Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería 2005
Granada, 4 a 7 de julio, 2005

CÁLCULO MIMÉTICO EN VARIEDADES DISCRETAS

E. Bendito[1], A. Carmona[1], A.M. Encinas[1] y J.M. Gesto[2]

1: Departament de Matemàtica Aplicada III
ETSECCPB, UPC
c/ Jordi Girona Salgado 1-3, 08034 Barcelona
e-mail: enrique.bendito,angeles.carmona,andres.marcos.encinas@upc.edu,
web: http://www-ma3.upc.es/users/bencar

2: Departament de Enginyeria del Terreny
ETSECCPB, UPC
c/ Jordi Girona Salgado 1-3, 08034 Barcelona
e-mail: jose.manuel.gesto@upc.edu,
web: http://www-ma3.upc.es/users/bencar

Palabras clave: Métodos miméticos, cálculo vectorial, variedades discretas, operadores en diferencias, redes finitas

Resumen. *En este trabajo presentamos un modelo de cálculo vectorial discreto sobre redes, estructuradas o no, siguiendo el guión proporcionado por la Geometría Diferencial. La clave para desarrollar un cálculo eficiente sobre variedades discretas que sea mimético al caso continuo reside en una adecuada definición del espacio tangente en cada vértice de la red. Esta estructura permite entonces considerar campos vectoriales, productos internos y tensores métricos generales, que conducen a las versiones discretas de los operadores, derivada, gradiente, divergencia, rotacional y laplaciano. Estos operadores satisfacen propiedades análogas a las verificadas por sus equivalente en el continuo y, en particular, permiten una formulación adecuada de problemas de contorno discretos generales.*

1. INTRODUCCIÓN

Los problemas lineales de contorno aparecen generalmente como las ecuaciones de estado de problemas de la física matemática, cuya resolución requiere algún tipo de aproximación. En los últimos años, bajo la denominación general de Discretizaciones Miméticas del Medio Continuo, se ha desarrollado una metodología que aborda estos problemas modelizándolos directamente sobre un espacio discreto que aproxime a un medio continuo, en lugar de discretizar las ecuaciones de estado mediante las técnicas usuales de diferencias finitas, elementos finitos, elementos de volumen, métodos espectrales o métodos sin malla. Este planteamiento requiere el desarrollo de un cálculo vectorial discreto sobre mallas, estructuradas o no, que contenga los análogos de los operadores diferenciales básicos. Por tanto, este cálculo vectorial discreto debe tener como ingredientes esenciales funciones y campos, relacionados mediante operadores discretos que jueguen el papel de los operadores diferenciales de primer orden con los que se formulan las ecuaciones cinemáticas y las de balance. Además, las versiones discretas de estos operadores deben satisfacer las mismas propiedades estructurales que sus referentes continuos, desde los resultados relativos a la composición, hasta los análogos del Teorema de la Divergencia y de las Identidades de Green.

Presentamos aquí un cálculo vectorial sobre variedades discretas, es decir sobre mallas generales, basado en la introducción del concepto de espacio tangente a cada nodo de la variedad. La expresión de los operadores en diferencias aquí obtenidos permiten entender nuestro modelo como un método mimético, lo que en particular posibilita una adecuada formulación de los problemas de contorno discretos. La relación de dichos problema de contorno con técnicas de aproximación tales como *diferencias finitas generalizadas* es ampliamente conocida, ver [11, 13] y para el caso de redes estructuradas ha sido analizado por los autores en [2, 3, 5].

En este trabajo denominamos *variedad discreta* a cualquier grafo $\Gamma = (V, E)$, localmente finito. Los elementos de V se denominan *nodos*, mientras que los elementos de E se denominan *aristas* de la variedad Γ.

Dos nodos diferentes $x, y \in V$ se denominan *adyacentes*, lo que será representado como $x \sim y$, si el par $\{x, y\} \in E$. La arista $e = \{x, y\}$ se representa indistintamente como e_{xy} o e_{yx} y en este caso la arista y los nodos x e y se denominan *incidentes*. Para cada nodo $x \in V$, E_x denota el conjunto de aristas incidentes con x y su cardinal se denomina *grado de* x y se denota por $k(x)$. Que una variedad discreta sea un grafo localmente finito significa que $k(x) < +\infty$ para cada $x \in V$. Cuando el conjunto de nodos sea finito la variedad discreta se denominará *finita*.

Una *orientación* sobre la variedad discreta $\Gamma = (V, E)$ es una aplicación $\tau\colon E \longrightarrow V$ tal que si $x = \tau(e)$ entonces x y e son incidentes. Para cada arista $e \in E$, el vértice $\tau(e)$ se denomina *final* de la arista, mientras que el vértice $\zeta(e)$ tal que $e = \{\tau(e), \zeta(e)\}$ se denomina *origen* de e. El par (Γ, τ) será llamado *variedad discreta orientada*.

En todo el trabajo supondremos que la variedad Γ es conexa, es decir, existe un camino entre cualquier par de nodos. Además, para cada par de nodos distintos x e y, denotaremos por $d(x, y)$ a la longitud del camino más corto entre ellos.

Por otra parte, será útil considerar $\mathcal{C}(V)$ el espacio de funciones definidas sobre los nodos de la variedad y también los siguientes conjuntos de funciones

$$\mathcal{C}(\Gamma) = \{f \in \mathcal{C}(V \times V) : f(x, y) = 0, \ \text{ si } \ d(x, y) \neq 1\},$$

$$\mathcal{C}(\Gamma \times \Gamma) = \{f \in \mathcal{C}(V \times V \times V) : f(x, y, z) = 0, \ \text{ si } \ d(x, y) \cdot d(x, z) \neq 1\}.$$

Diremos que $f \in \mathcal{C}(\Gamma)$ es *simétrica*, respectivamente *antisimétrica* sii $f(x, y) = f(y, x)$, respectivamente sii $f(x, y) = -f(y, x)$, para cada $x, y \in V$.

Fijada $f \in \mathcal{C}(\Gamma)$, denominaremos *parte simétrica* y *parte antisimétrica* de f a las funciones $f^s(x, y) = \frac{1}{2}\left(f(x, y) + f(y, x)\right)$ y $f^a(x, y) = \frac{1}{2}\left(f(x, y) - f(y, x)\right)$, respectivamente. Además, f^s es simétrica, f^a es antisimétrica y se satisface que $f = f^s + f^a$.

Si $u \in \mathcal{C}(V)$ el *soporte de* u es el conjunto $\mathsf{sop}(u) = \{x \in V : u(x) \neq 0\}$, mientras que si $f \in \mathcal{C}(\Gamma)$, el *soporte de* f es el conjunto $\mathsf{sop}(f) = \{x \in V : \text{existe } y \sim x \text{ con } f(x,y) \neq 0\}$.

2. CAMPOS SOBRE UNA VARIEDAD DISCRETA

En esta sección definiremos los conceptos de campo vectorial, campo de aplicaciones lineales y campo de aplicaciones bilineales, que deberán tener el mismo carácter local que sus análogos continuos. Estos conceptos permitirán dotar a las variedades discretas de estructuras adecuadas para definir sobre ellas operadores en diferencias que hagan posible el desarrollo de un cálculo vectorial mimético.

2.1. El espacio tangente

La clave para definir todas las nociones anteriores reside en la construcción del espacio tangente a cada nodo. Para cada $x \in V$, denominaremos *espacio tangente en* x, y lo denotaremos como $T_x(\Gamma)$, al espacio vectorial real de la combinaciones lineales formales de las aristas incidentes con x. Obsérvese que para cada $x \in V$, E_x es una base $T_x(\Gamma)$ que denominaremos *base coordenada*. Por tanto $\dim T_x(\Gamma) = k(x)$, lo que significa que a diferencia del caso continuo, la dimensión del espacio tangente en una variedad discreta varía con cada nodo.

2.2. Campos vectoriales

Denominaremos *campo vectorial sobre* Γ a cualquier aplicación $\mathsf{f} : V \longrightarrow \bigcup\limits_{x\in V} T_x(\Gamma)$ tal que $\mathsf{f}(x) \in T_x(\Gamma)$ para cada $x \in V$. Denotaremos por $\mathcal{X}(\Gamma)$ al espacio de campos vectoriales.

Cada campo vectorial sobre Γ está unívocamente determinado por sus componentes en cada base coordenada. Por tanto cada $\mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma)$ puede ser identificado con la función $f\mathcal{C}(\Gamma)$, denominada *componente de* f, tal que $\mathsf{f}(x) = \sum\limits_{y\sim x} f(x,y)e_{xy}$.

Un campo vectorial f se denomina simétrico o antisimétrico sii su función componente tiene el mismo carácter. Además, si $\mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma)$, entonces $\mathsf{f} = \mathsf{f}^s + \mathsf{f}^a$, donde los campos f^s y f^a tienen como funciones componentes f^s y f^a, respectivamente y son denominados *parte simétrica de* f y *parte antisimétrica de* f.

Si $\mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma)$, se denomina *soporte de* f al conjunto $\mathsf{sop}(\mathsf{f}) = \{x \in V : \mathsf{f}(x) \neq \mathsf{0}\} = \mathsf{sop}(f)$.

2.3. Campos de aplicaciones lineales y bilineales

Para cada $x \in V$, sean $\mathcal{T}^1_{1\,x}(\Gamma)$ y $\mathcal{T}^2_x(\Gamma)$ los espacios de endomorfismos y formas bilineales, o si se prefiere de tensores de tipo $(1,1)$ y $(2,0)$, sobre $T_x(\Gamma)$. Cualquier aplicación $\mathsf{M}\colon V \longrightarrow \bigcup\limits_{x\in V} \mathcal{T}^1_{1\,x}(\Gamma)$ tal que $\mathsf{M}(x) \in \mathcal{T}^1_{1\,x}(\Gamma)$ para cada $x \in V$, será denominada *campo de endomorfismos sobre* Γ, o también campo tensorial de tipo $(1,1)$ sobre Γ. El espacio de los campos de endomorfismos sobre Γ será denotado por $\mathcal{T}^1_1(\Gamma)$.

Cualquier aplicación $\mathsf{B}\colon V \longrightarrow \bigcup\limits_{x\in V} \mathcal{T}^2_x(\Gamma)$ tal que $\mathsf{B}(x) \in \mathcal{T}^2_x(\Gamma)$ para cada $x \in V$, será denominada *forma bilineal sobre* Γ, o también campo tensorial covariante de orden 2 sobre Γ. El espacio de formas bilineales sobre Γ será denotado por $\mathcal{T}^2(\Gamma)$.

Si $\mathsf{B} \in \mathcal{T}^2(\Gamma)$, entonces B se denomina *simétrico, definido, ortogonal*, etc. si para cada $x \in V$, la aplicación bilineal $\mathsf{B}(x)$ es simétrica, definida o la base coordenada es ortogonal, respecto de $\mathsf{B}(x)$. En particular, si para cada $x \in V$, $\mathsf{B}(x)$ es un producto interno sobre $T_x(\Gamma)$, entonces B se denomina *tensor métrico* sobre Γ. En particular, él único tensor métrico que hace que para cada $x \in V$ la base coordenada sea ortonormal, se denomina *tensor métrico canónico* y será denotada por $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Análogamente al caso de campos vectoriales, cada forma bilineal sobre Γ está unívocamente determinada por sus componentes en cada base coordenada y por tanto cada $\mathsf{B} \in \mathcal{T}^2(\Gamma)$ puede ser identificada con la función $m \in \mathcal{C}(\Gamma \times \Gamma)$, denominada *componente de* B, tal que $\mathsf{B}(x)(e_{xy}, e_{xz}) = m(x, y, z)$.

La existencia de una base coordenada en $T_x(\Gamma)$ permite identificar de manera natural los espacios $\mathcal{T}_1^1(\Gamma)$ y $\mathcal{T}^2(\Gamma)$. Si $\mathsf{B} \in \mathcal{T}^2(\Gamma)$ y $\mathsf{M} \in \mathcal{T}_1^1(\Gamma)$ están identificados, la función componente de B será también denominada *función componente de* M.

Si M es un campo de automorfismos, denotaremos por M^{-1} al campo de automorfismos determinado por la asignación $\mathsf{M}^{-1}(x)$ para cada $x \in V$ y por B^{-1} a su forma bilinear asociada.

Si $\mathsf{M} \in \mathcal{T}_1^1(\Gamma)$ y $\mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma)$, la aplicación $\mathsf{Mf}\colon V \longrightarrow T(\Gamma)$, dada por $\mathsf{Mf}(x) = \mathsf{M}(x)(\mathsf{f}(x))$ para cada $x \in V$ define define un campo vectorial sobre Γ y además se satisface que $\mathsf{sop}(\mathsf{Mf}) \subset \mathsf{sop}(\mathsf{f})$. Análogamente, si $\mathsf{B} \in \mathcal{T}^2(\Gamma)$ y $\mathsf{f}, \mathsf{g} \in \mathcal{X}(\Gamma)$, entonces tiene sentido la aplicación $\mathsf{B}(\mathsf{f}, \mathsf{g}) \in \mathcal{C}(V)$ definida como $\mathsf{B}(\mathsf{f}, \mathsf{g})(x) = \mathsf{B}(x)(\mathsf{f}(x), \mathsf{g}(x))$ y además, si $\mathsf{B} \in \mathcal{T}^2(\Gamma)$ y $\mathsf{M} \in \mathcal{T}_1^1(\Gamma)$ están asociados, entonces $\mathsf{B}(\mathsf{f}, \mathsf{g}) = \langle \mathsf{Mf}, \mathsf{g} \rangle$.

2.4. Orden de un operador lineal

Una de las características del cálculo vectorial que presentamos es que reconoce los operadores en diferencias básicos, derivada, gradiente, divergencia y rotacional como operadores de primer orden, mientras que operadores como el laplaciano aparecen, en general, como ejemplos naturales de operadores de segundo orden. Esta propiedad representa pues una ajustada versión discreta de los referentes continuos de estos operadores. Es importante señalar que la noción de orden de un operador ha sido o bien ignorada en la mayor parte de los trabajos relativos a las discretizaciones miméticas, o bien objeto de, a nuestro entender, poco acertadas definiciones, ver por ejemplo [14] y también [4] para un análisis más extenso sobre este concepto.

Cualquier campo de endomorfismos sobre Γ, puede entenderse como un endomorfismo de $\mathcal{X}(\Gamma)$, puesto que si $\mathsf{M} \in \mathcal{T}_1^1(\Gamma)$, podemos definir $\mathcal{M}\colon \mathcal{X}(\Gamma) \longrightarrow \mathcal{X}(\Gamma)$ como $\mathcal{M}(\mathsf{f}) = \mathsf{Mf}$ y claramente es una transformación lineal que además tiene carácter local pues no incrementa el soporte de los argumentos, es decir $\mathsf{sop}(\mathcal{M}(\mathsf{f})) \subset \mathsf{sop}(\mathsf{f})$. Es fácil comprobar que no todo endomorfismo de $\mathcal{X}(\Gamma)$ tiene esta propiedad: por ejemplo las aplicaciones $\mathcal{A}, \mathcal{S}\colon \mathcal{X}(\Gamma) \longrightarrow \mathcal{X}(\Gamma)$ definidas respectivamente como $\mathcal{A}(\mathsf{f}) = \mathsf{f}^{\mathsf{a}}$ y $\mathcal{S}(\mathsf{f}) = \mathsf{f}^{\mathsf{s}}$ no la verifican, aunque sin embargo satisfacen que $\mathsf{sop}(\mathcal{A}(\mathsf{f})), \mathsf{sop}(\mathcal{S}(\mathsf{f})) \subset \{x \in V : d(x, \mathsf{sop}(\mathsf{f})) \leq 1\}$.

El ejemplo anterior nos induce a introducir una clasificación de los operadores lineales en términos de los soportes de los argumentos y de las imágenes. Para fijar ideas, consideremos los subespacios vectoriales $\mathcal{V}_1 \subset \mathcal{X}(\Gamma)$, $\mathcal{V}_2 \subset \mathcal{C}(V)$ y los operadores lineales

$$\mathcal{F}\colon \mathcal{V}_1 \longrightarrow \mathcal{X}(\Gamma),\ \mathcal{G}: \mathcal{V}_2 \longrightarrow \mathcal{X}(\Gamma),\ \mathcal{H}\colon \mathcal{V}_1 \longrightarrow \mathcal{C}(V) \text{ and } \mathcal{K}\colon \mathcal{V}_2 \longrightarrow \mathcal{C}(V).$$

Diremos que $\mathcal{F}$, $\mathcal{G}$, $\mathcal{H}$ y $\mathcal{K}$ son *operadores de orden* n si n es el menor natural tal que para cada $\mathsf{f} \in \mathcal{V}_1$ y cada $u \in \mathcal{V}_2$ se satisface que

$$\begin{aligned} \mathsf{sop}(\mathcal{F}(\mathsf{f})),\ \mathsf{sop}(\mathcal{H}(\mathsf{f})) &\subset \{x \in V : d(x, \mathsf{sop}(\mathsf{f})) \le n\}, \\ \mathsf{sop}(\mathcal{G}(u)),\ \mathsf{sop}(\mathcal{K}(u)) &\subset \{x \in V : d(x, \mathsf{sop}(u)) \le n\}. \end{aligned}$$

En particular, los operadores $\mathcal{A}$ y $\mathcal{S}$ introducidos anteriormente son operadores de primer orden, mientras cada endomorfismo de $\mathcal{X}(\Gamma)$ asociado a un campo de endomorfismos sobre Γ es un operador de orden 0. Este tipo de operadores también serán denominados *operadores locales.*

3. OPERADORES EN DIFERENCIAS EN UNA VARIEDAD DISCRETA

Uno de los principales objetivos de esta sección es definir el concepto de *variedad Riemanniana discreta*, introduciendo para ello métricas generales sobre una variedad discreta. Esta estructura, junto con la definición de productos internos sobre los espacios de funciones y de campos, nos permitirá introducir los operadores en diferencias básicos de primer orden, esto es la derivada, el gradiente y la divergencia. Una vez construidos, su composición dará lugar al operador de Laplace, que es el operador fundamental de segundo orden y que además puede considerarse como la contrapartida discreta o combinatoria del operador de Laplace-Beltrami sobre una variedad Riemanniana.

Por otra parte, en el contexto de los métodos miméticos, el cálculo vectorial relativo a operadores de primer orden se completa con la introducción del análogo discreto del operador rotacional [8, 11, 12, 15]. Como en todos estos trabajos sólo se consideran funciones definidas sobre aristas, es necesario tener en cuenta la red dual para definir el operador rotacional, de manera que mimetice las propiedades de su contrapartida continua. En la estructura que presentamos esto no es necesario, ya que la consideración de campos simétricos y antisimétricos sobre la red primal evita la construcción de la dual.

3.1. Variedades Riemannianas discretas

En este apartado definiremos productos internos tanto sobre el espacio de funciones de nodos como sobre el espacio de campos vectoriales en una variedad discreta $\Gamma = (V, E)$.

Una función $\nu \in \mathcal{C}(V)$ se denomina *peso sobre* V si $\nu(x) > 0$ para cada $x \in V$. Si $\mathcal{C}_0(V)$ denota el espacio de funciones con soporte finito, entonces para cada peso ν sobre V, la expresión

$$\int_V u(x)v(x)\nu(x)dx = \sum_{x \in V} u(x)v(x)\nu(x), \qquad u, v \in \mathcal{C}_0(V) \tag{1}$$

determina un producto interno sobre $\mathcal{C}_0(V)$.

Denominaremos *variedad Riemanniana discreta* a una tripleta $(\Gamma, \mathsf{B}, \mu)$ donde Γ es una variedad discreta, B es un tensor métrico y μ es un peso sobre V.

Si $(\Gamma, \mathsf{B}, \mu)$ es una variedad Riemanniana discreta y $\mathcal{X}_0(\Gamma)$ denota el espacio de campos vectoriales con soporte finito, la expresión

$$\frac{1}{2}\int_V \mathsf{B}(\mathsf{f},\mathsf{g})(x)\mu(x)dx = \frac{1}{2}\sum_{x\in V}\mathsf{B}(\mathsf{f},\mathsf{g})(x)\mu(x), \qquad \mathsf{f},\mathsf{g}\in\mathcal{X}_0(\Gamma) \tag{2}$$

determina un producto interno sobre $\mathcal{X}_0(\Gamma)$.

3.2. Operadores en diferencias de primer orden

En este apartado definiremos los análogos discretos de de los operadores diferenciales de primer orden sobre variedades Riemannianas. Para ello, partiremos, como es habitual en el cálculo mimético, de un operador básico que no precisa de la introducción de un tensor métrico y por tanto podría definirse sobre una variedad discreta genérica.

En lo que sigue consideraremos fijados Γ una variedad discreta, τ una orientación sobre ella, B un tensor métrico y M el campo de endomorfismos asociado a B.

Si $u\in\mathcal{C}(V)$, denominaremos *derivada de* u al campo vectorial

$$\mathsf{d}u(x) = \sum_{e\in E_x}\Big(u(\tau(e) - u(\zeta(e)\Big)e \tag{3}$$

y *gradiente de* u al campo vectorial

$$\nabla u = \mathsf{M}^{-1}\mathsf{d}u. \tag{4}$$

Es fácil comprobar que $\mathsf{d}\colon\mathcal{C}(V)\longrightarrow\mathcal{X}(\Gamma)$ es un operador lineal de primer orden, lo que implica que $\nabla\colon\mathcal{C}(V)\longrightarrow\mathcal{X}(\Gamma)$ tiene también estas propiedades. Además para cada $u\in\mathcal{C}(V)$, el campo $\mathsf{d}u$ es siempre simétrico, mientras que en general ∇u no es ni simétrico ni antisimétrico.

Si ahora consideramos ν y μ dos pesos sobre V y los productos internos sobre $\mathcal{C}_0(V)$ y $\mathcal{X}_0(\Gamma)$ inducidos por ellos y por el tensor métrico B, entonces $\nabla\colon\mathcal{C}_0(V)\longrightarrow\mathcal{X}_0(\Gamma)$, es un operador entre espacios con producto interno y tiene sentido considerar su operador adjunto. Denominaremos *operador divergencia* y lo denotaremos como div al operador $-\nabla^*$. Por tanto, el operador divergencia es lineal y está caracterizado por la identidad

$$\frac{1}{2}\int_V \mathsf{B}(\nabla u,\mathsf{f})(x)\mu(x)dx = -\int_V u(x)\,\mathsf{div}\,\mathsf{f}(x)\nu(x)dx, \qquad u\in\mathcal{C}_0(V),\mathsf{f}\in\mathcal{X}_0(\Gamma). \tag{5}$$

Una consecuencia importante de la identidad anterior es que el operador divergencia es independiente del tensor métrico considerado y sólo depende de las funciones de peso ν y μ sobre el espacio de nodos.

Un moderado desarrollo algebraico muestra que si $\mathsf{f} \in \mathcal{X}_0(\Gamma)$ y f es su función componente, entonces para cada $x \in V$ se tiene que

$$\mathsf{div}\, \mathsf{f}(x) = \frac{1}{\nu(x)} \left[\sum_{\zeta(e_{xy})=x} (\mu f)^s(x,y) - \sum_{\tau(e_{xy})=x} (\mu f)^s(x,y) \right]. \tag{6}$$

Una consecuencia inmediata de esta identidad es que puede extenderse a campos generales, no necesariamente de soporte finito y que además $\mathsf{div}\colon \mathcal{X}(\Gamma) \longrightarrow \mathcal{C}(V)$ es un operador de primer orden. Además, la identidad (5) continua siendo válida si sólo uno de los elementos, la función u o el campo f tiene soporte finito.

Completamos las definiciones de los operadores básicos de primer orden definiendo para cada $\mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma)$ el campo *rotacional de* f como

$$\mathsf{rot}\, \mathsf{f} = \frac{1}{\mu}\, (\mathsf{Mf})^a \tag{7}$$

Como consecuencia inmediata de esta definición obtenemos que $\mathsf{rot}\colon \mathcal{X}(\Gamma) \longrightarrow \mathcal{X}(\Gamma)$ es un operador lineal de primer orden.

3.3. Propiedades miméticas

Para que un cálculo vectorial discreto pueda considerarse mimético, los operadores en diferencias deben satisfacer propiedades análogas a las satisfechas por sus referentes continuos, por ejemplo debe ocurrir que si el gradiente de una función es nulo, entonces la función debe ser constante, ver [9, 10, 12]. Nuestro propósito en esta sección será mostrar que el cálculo vectorial de primer orden que acabamos de definir satisface dichas propiedades y puede considerarse por tanto como un modelo de cálculo mimético.

Teniendo presente la expresión (3) y que por hipótesis la variedad es conexa, se obtiene fácilmente que una función $u \in \mathcal{C}(V)$ es constante sii $\mathsf{d}u = \mathsf{0}$ y, como M es un campo de automorfismos, sii $\nabla u = \mathsf{0}$.

De la identidad (7) se concluye que para cada $\mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma)$ el campo $\mu \mathsf{rot}\, \mathsf{f}$ es antisimétrico y por tanto

$$\mathsf{div}(\mathsf{rot}\, \mathsf{f}) = 0, \quad \text{para cada } \mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma), \tag{8}$$

es decir, todo campo con potencial vector es solenoidal.

Por otra parte, como para cada $u \in \mathcal{C}(V)$ el campo $\mathsf{d}u$ es simétrico, de la identidad (7) se concluye también que

$$\mathsf{rot}(\nabla u) = \mathsf{0}, \quad \text{para cada } u \in \mathcal{C}(V), \tag{9}$$

es decir, todo campo gradiente es irrotacional.

Un poco más de esfuerzo algebraico permite concluir que el operador rot es autoadjunto, respecto del producto interno en $\mathcal{X}_0(\Gamma)$, es decir satisface que

$$\int_V \mathsf{B}(\mathsf{rot}\, \mathsf{f}, \mathsf{g})(x)\mu(x)dx = \int_V \mathsf{B}(\mathsf{f}, \mathsf{rot}\, \mathsf{g})(x)\mu(x)dx, \quad \text{para cada } \mathsf{f}, \mathsf{g} \in \mathcal{X}_0(\Gamma). \tag{10}$$

Finalmente, señalaremos que también se verifica la forma más general para este tipo de resultados, que no es otra que la verificación del *Teorema de descomposición de Helmholtz:*

Para cada $\mathsf{f} \in \mathcal{X}_0(\Gamma)$ existen una función $u \in \mathcal{C}_0(V)$ y campos $\mathsf{g}, \mathsf{h} \in \mathcal{X}_0(\Gamma)$ tales que

$$\mathsf{f} = \nabla u + \mathsf{rot}\,\mathsf{g} + \mathsf{h}, \quad \text{donde } \ \mathsf{div}\,\mathsf{h} = 0 \ \text{ y } \ \mathsf{rot}\,\mathsf{h} = 0. \tag{11}$$

Además los campos $\nabla u, \mathsf{rot}\,\mathsf{g}$ y h están unívocamente determinados, ver [4].

3.4. Operadores en diferencias de segundo orden

En este apartado introduciremos los operadores básicos de segundo sobre sobre el espacio de nodos de una variedad Riemanniana discreta. Estos operadores se obtienen como composición de dos operadores de primer orden por lo cual resultan ser de segundo orden, a lo sumo.

Los operadores de primer orden que utilizaremos para componer los de segundo son la derivada y la divergencia. Como ambos son independientes del tensor métrico considerado sobre Γ, podemos suponer, sin pérdida de generalidad, que Γ está dotada del tensor métrico canónico $\langle\cdot,\cdot\rangle$ y fijaremos dos funciones de peso ν y μ sobre el espacio de nodos de Γ.

Para cada campo de endomorfismos, $\mathsf{A} \in \mathcal{T}_1^1(\Gamma)$, definimos $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}\colon \mathcal{C}(V) \longrightarrow \mathcal{C}(V)$ mediante la asignación

$$\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u) = -\mathsf{div}(\mathsf{A}\mathsf{d}u), \quad \text{para cada } \ u \in \mathcal{C}(V). \tag{12}$$

Es claro que $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}$ es un operador lineal cuyo orden es 2 a lo sumo, pues resulta de la composición de div con $\mathsf{A} \circ \mathsf{d}$, ambos operadores lineales de primer orden.

De la definión del operador $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}$ y de la identidad (5) se concluye con la siguiente versión de la *Identidad de Green*

$$\int_V v(x)\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x)\nu(x)dx = \frac{1}{2}\int_V \langle \mathsf{A}\mathsf{d}u, \mathsf{d}v\rangle \mu(x)dx, \quad u \in \mathcal{C}(V), v \in \mathcal{C}_0(V). \tag{13}$$

La igualdad (13) implica que $\mathcal{L}^{\mathsf{A}^t}$ es el operador adjunto de $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}$ en el espacio $\mathcal{C}_0(V)$ y además que

$$\int_V \mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x)\nu(x)dx = 0, \quad \text{para cada } \ u \in \mathcal{C}_0(V). \tag{14}$$

Para obtener una expresión explícita del operador $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}$, supondremos que $a \in \mathcal{C}(\Gamma \times \Gamma)$ es la función componente de A y definiremos la función $a_\tau \in \mathcal{C}(\Gamma \times \Gamma)$ mediante la asignación

$$a_\tau(x,y,z) = \begin{cases} a(x,y,z), & \text{si } \ x = \tau(e_{xy}) = \tau(e_{xz}) \ \text{ ó } \ x = \zeta(e_{xy}) = \zeta(e_{xz}), \\ -a(x,y,z), & \text{si } \ x = \tau(e_{xy}) = \zeta(e_{xz}) \ \text{ ó } \ x = \zeta(e_{xy}) = \tau(e_{xz}), \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{15}$$

y también $\mathsf{c}_{\mathsf{A}}\colon V \times V \longrightarrow \mathbb{R}$ mediante la asignación $c_{\mathsf{A}}(x,x) = 0$ para cada $x \in V$ y

$$\mathsf{c}_{\mathsf{A}}(x,y) = \frac{1}{2}\sum_{z\in V}\Big[\mu(x)a_\tau(x,y,z) + \mu(y)a_\tau(y,z,x) - \mu(z)a_\tau(z,x,y)\Big], \quad \text{si } \ x \neq y. \tag{16}$$

A la vista de la definición de la función c_{A}, resulta inmediato que $\mathsf{c}_{\mathsf{A}}(x,y) = \mathsf{c}_{\mathsf{A}^t}(y,x)$ para cada $x,y \in V$ y por tanto que c_{A} es una función simétrica cuando el campo de endomorfismos A es a su vez simétrico. Por otra parte, como $a \in \mathcal{C}(\Gamma\times\Gamma)$, la identidad (16) implica que $c_{\mathsf{A}}(x,y) = \frac{1}{2}\sum\limits_{z\in V}\Big[\mu(x)a_\tau(x,y,z) + \mu(y)a_\tau(y,z,x)\Big]$ cuando $d(x,y)=1$ y x e y no son vértices de ningún triángulo, $c_{\mathsf{A}}(x,y) = -\frac{\mu(z)}{2}\sum\limits_{z\in V} a_\tau(z,x,y)$ cuando $d(x,y)=2$ y que $c_{\mathsf{A}}(x,y) = 0$ cuando $d(x,y) > 2$.

Una vez definida la aplicación c_{A} y tras una manipulación algebraica se llega a la identidad

$$\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x) = \frac{1}{\nu(x)}\sum_{y\in V} c_{\mathsf{A}}(x,y)\Big(u(x)-u(y)\Big) \quad \text{para cada } \ u \in \mathcal{C}(V), \tag{17}$$

que en particular implica que cuando A es un campo simétrico se satisface

$$\int_V v(x)\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x)\nu(x)dx = \frac{1}{2}\int_{V\times V} \mathsf{c}_{\mathsf{A}}(x,y)\Big(u(x)-u(y)\Big)\Big(v(x)-v(y)\Big)dxdy, \tag{18}$$

válida cuando $u \in \mathcal{C}(V)$ y $v \in \mathcal{C}_0(V)$, lo que constituye una nueva versión de la Identidad de Green.

Finalizaremos esta sección suponiendo que sobre Γ está además definido un tensor métrico B, cuyo campo de automorfismos asociado es M. Si $\mathsf{A} = \mathsf{M}^{-1}$, entonces $\mathsf{Ad}u = \nabla u$ y por tanto $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u) = -\Delta$, donde Δ es el *operador de Laplace de la variedad Riemanniana discreta*. En este caso, la función c_{A} se denomina *función coeficiente de la variedad Riemanniana* Γ.

4. EL TEOREMA DE LA DIVERGENCIA

Una vez definido el concepto de variedad Riemanniana discreta y elaborado un cálculo en diferencias, para completar el cálculo vectorial discreto es necesario describir un cálculo integral sobre dichas variedades. Como nuestro propósito en este trabajo es el planteamiento de problemas de contorno discretos, restringiremos la exposición al desarrollo del Teorema de la Divergencia que, en particular, tiene como consecuencia la verificación de las Identidades de Green.

La búsqueda del análogo discreto del Teorema de la Divergencia en un subconjunto compacto, implica abordar una teoría de integración para las funciones definidas en un conjunto finito de nodos, lo que además requiere introducir el concepto de campo normal a un subconjunto de nodos de una variedad discreta.

Si $F \subset V$ la *adherencia de* F es el conjunto de nodos $\bar{F} = \{x \in V : d(x,F) \le 1\}$ y la *frontera de* F es el conjunto $\delta(F) = \bar{F}\setminus F = \{x \in V : d(x,F) = 1\}$. Denotaremos por $\mathcal{C}(F)$ al conjunto de elementos de $\mathcal{C}(V)$ cuyo soporte está contenido en F.

Denominaremos *campo normal exterior a* F, y lo denotaremos por n_F, al opuesto del campo derivada de la función característica de F, es decir $\mathsf{n}_F = -\mathsf{d}\chi_F$. Entonces, $\mathsf{n}_F =$

$\mathsf{d}\chi_{F^c}$ y la función componente de n_F está dada por

$$n_F(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{si } x \sim y, \ \ \tau(e_{xy}) \in \delta(F) \ \text{ y } \ \zeta(e_{xy}) \in F, \\ -1, & \text{si } x \sim y, \ \ \tau(e_{xy}) \in F \ \text{ y } \ \zeta(e_{xy}) \in \delta(F), \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{19}$$

Mantendremos fijado en el resto de la sección $F \subset V$ un subconjunto finito de nodos y n_F su campo normal exterior. Entonces el *Teorema de la Divergencia* se formula mediante la identidad

$$\int_F \operatorname{div} \mathsf{f}(x)\nu(x)dx = \int_{\delta(F)} \langle \mathsf{n}_F, (\mu\mathsf{f})^s\rangle(x)dx, \quad \text{para cada } \ \mathsf{f} \in \mathcal{X}(\Gamma), \tag{20}$$

que cuando $\mu\mathsf{f}$ es un campo simétrico se reduce a

$$\int_F \operatorname{div} \mathsf{f}(x)\nu(x)dx = \int_{\delta(F)} \langle \mathsf{n}_F, \mathsf{f}\rangle(x)\mu(x)dx. \tag{21}$$

Si consideramos A un campo de endomorfismos simétricos, entonces la *derivada conormal según* A es el operador $\dfrac{\partial}{\partial \mathsf{n}_{\mathsf{A}}}\colon \mathcal{C}(\bar{F}) \longrightarrow \mathcal{C}(\delta(F))$ definido por la asignación

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \mathsf{n}_{\mathsf{A}}}\right)(x) = \frac{1}{\nu(x)} \sum_{y \in F} \mathsf{c}_{\mathsf{A}}(x,y)\Big(u(x) - u(y)\Big), \quad x \in \delta(F), \quad u \in \mathcal{C}(\bar{F}), \tag{22}$$

que claramente es un operador lineal de primer orden. Para introducir la *Identidad de Green* relativa al operador de segundo orden $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}$, es preciso definir un par de funciones ligadas a F y a los valores de la función c_{A} concretamente,

$$q_F(x) = \sum_{y \notin \bar{F}} \mathsf{c}_{\mathsf{A}}(x,y), \quad x \in F \quad \text{ y } \quad b = \mathsf{c}_{\mathsf{A}} \cdot \chi_{F \times \bar{F} \cup \bar{F} \times F}. \tag{23}$$

La Identidad de Green relativa al operador de segundo orden $\mathcal{L}^{\mathsf{A}}$ se establece mediante la igualdad

$$\begin{aligned} \int_F v(x)\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x)\nu(x)dx &= \int_{\bar{F}\times\bar{F}} b(x,y)\Big(u(x) - u(y)\Big)\Big(v(x) - v(y)\Big)dxdy \\ &+ \int_F q_F(x)u(x)v(x) - \int_{\delta(F)} \left(\frac{\partial u}{\partial \mathsf{n}_{\mathsf{A}}}\right)(x)v(x)\nu(x)dx \end{aligned} \tag{24}$$

válida para cada $u, v \in \mathcal{C}(\bar{F})$.

5. PROBLEMAS DE CONTORNO

Una de las aplicaciones más relevantes del cálculo vectorial discreto es la correcta formulación de problemas de contorno discretos. Un estudio exhaustivo de los problemas de contorno autoadjuntos ha sido abordado en [1], para tensores métricos ortogonales y en [7] para tensores métricos generales. En ambos trabajos se ha desarrollado también una Teoría del Potencial asociada a tales problemas, completando así la analogía con los problemas de contorno elípticos en el caso continuo.

Consideraremos fijados el tensor métrico canónico, $\mathsf{A} \in \mathcal{T}_1^1(\Gamma)$, $\mathsf{k} \in \mathcal{X}(\Gamma)$, ν y μ dos pesos sobre Γ, $F \subset V$ un conjunto finito de nodos y $q \in \mathcal{C}(F)$. Supondremos además que también están fijadas una cierta partición de la frontera de F, es decir que $\delta(F) = F_1 \cup F_2$ con $F_1 \cap F_2 = \emptyset$ y una función $h \in \mathcal{C}(F_1)$.

Un *problema de contorno sobre* $\bar{F}$ consiste en dadas las funciones $f \in \mathcal{C}(F)$, $g_1 \in \mathcal{C}(F_1)$ y $g_2 \in \mathcal{C}(F_2)$ hallar las funciones $u \in \mathcal{C}(\bar{F})$ tales que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x) + \langle \mathsf{k}, \nabla u\rangle(x) + q(x)u(x) = f(x), &\qquad x \in F,\\ \left(\frac{\partial u}{\partial \mathsf{n}_{\mathsf{A}}}\right)(x) + h(x)u(x) = \;\; g_1(x), &\quad\; x \in F_1,\\ u(x) = \;\; g_2(x), &\quad\; x \in F_2. \end{aligned} \tag{25}$$

Tal como ha sido formulado, el problema (25) se denomina de forma genérica *problema Mixto Dirichlet-Robin* y sumariza los diferentes problemas de contorno que aparecen con nombre propio en la literatura:

i) *Problema de Dirichlet:* $\delta(F) = F_2$, es decir $F_1 = \emptyset$.

ii) *Problema de Robin:* $\delta(F) = F_1$, es decir $F_2 = \emptyset$.

iii) *Problema de Neumann:* $\delta(F) = F_1$, es decir $F_2 = \emptyset$ y además $h = 0$.

iv) *Problema mixto Dirichlet-Neumann:* $F_1, F_2 \neq \emptyset$ y $h = 0$.

A los problemas anteriores puede añadirse la denominada *ecuación de Poisson* que tiene sentido cuando la variedad es finita y $F = V$, lo que implica que $\delta(F) = \emptyset$. En este caso, el problema (25) se reduce a

$$\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u) + \langle \mathsf{k}, \nabla u\rangle + qu = f, \tag{26}$$

de gran importancia en el análisis de redes finitas, ver por ejemplo [6].

Si el campo de endomorfismos A es simétrico y $\mathsf{k} = 0$, entonces el problema (25) es *autoadjunto*, es decir

$$\int_F \Big[\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(u)(x) + q(x)u(x)\Big]\, v(x)\nu(x)dx = \int_F \Big[\mathcal{L}^{\mathsf{A}}(v)(x) + q(x)v(x)\Big]\, u(x)\nu(x)dx \tag{27}$$

para cada $u,v \in \mathcal{C}(F \cup F_1)$ tales que $\dfrac{\partial u}{\partial \mathsf{n}_{\mathsf{A}}} + hu = \dfrac{\partial v}{\partial \mathsf{n}_{\mathsf{A}}} + hv = 0$ en F_1. Si además en este caso, la función b definida en (23) satisface que $b \geq 0$, (*hipótesis de elipticidad*) y las funciones q y h verifican que $q \geq -q_{_F}$ y $h \geq 0$, entonces el funcional cuadrático $\mathcal{J}\colon \mathcal{C}(\bar{F}) \longrightarrow \mathbb{R}$ dado por la identidad

$$\mathcal{J}(u) = \int_{\bar{F}\times\bar{F}} b(x,y)(u(x)-u(y))^2 + \int_F (q_{_F}+q)\nu u^2 + \int_{F_1} h\nu u^2 - 2\int_F fu\nu - 2\int_{F_1} g_1 u\nu, \quad (28)$$

es estrictamente convexo y se satisface el *Principio de Dirichlet:* u es solución del problema de contorno (25) sii u minimiza $\mathcal{J}$ sobre el convexo $K_{g_2} = \{v \in \mathcal{C}(\bar{F}) : u = g_2 \text{ sobre } F_2\}$.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la CICYT, proyecto BFM2003-06014, y por la ETSECCPB.

REFERENCIAS

[1] E. Bendito, A. Carmona and A. M. Encinas, Solving boundary value problems on networks using equilibrium measures, *J. Funct. Anal.* **171** (2000), 155-176.

[2] E. Bendito, A. Carmona and A. M. Encinas, *Cálculo vectorial discreto para esquemas en diferencias sobre redes triangulares*, J.M. Jornet, J.M. López, C. Olivé y R. Ramírez, *XVIII CEDYA-VIII CMA,* (2003).

[3] E. Bendito, A. Carmona and A. M. Encinas, Difference schemes on uniform grids performed by general discrete operators, *Appl. Num. Math.*, **50** (2004), 343-370.

[4] E. Bendito, A. Carmona and A. M. Encinas, Vector Calculus on Discrete Riemannian Manifolds, preprint 2005, *submitted.*

[5] E. Bendito, A. Carmona and A. M. Encinas, Una formulación mimética de los esquemas en diferencias, *Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería 2005*, (2005).

[6] F.R.K Chung, *Spectral Graph Theory*, CBMS 92, American Mathematical Society, (1997).

[7] A.M. Encinas, *Problemas de Contorno Discretos,* Tesis Doctoral, UPC (2001).

[8] R. Hiptmair, Discrete Hodge Operators, *Numer. Math.* **90** (2001), 265-289.

[9] J.M. Hyman and M. Shashkov, Natural discretizations for the divergence, gradient and curl on logically rectangular grids, *Comput. Math. Appl.* **33** (1997), 413-442.

[10] J.M. Hyman and M. Shashkov, Adjoint operators for the natural discretizations of the divergence, gradient and curl on logically rectangular grids, *Appl. Num. Math.*, **25** (1997), 343-370.

[11] J.M. Hyman and M. Shashkov, The orthogonal descomposition theorems for mimetic finite difference methods, *SIAM. J. Numer. Anal.* **36** (1999), 788-818.

[12] J.M. Hyman and S. Steinberg, The convergence of Mimetic Discretization for Rough Grids, *Comput. Math. Appl.* **47** (2004), 1565-1610.

[13] L.G. Margolin, M. Shashkov and P.K. Smolarkiewicz, A discrete operator calculus for finite difference approximations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **187** (2000), 365-383.

[14] S.P. Novikov, Schrödinger operators on graphs and symplectic geometry, in *The Arnoldfest (Toronto, ON, 1997)*, Fields Inst. Commun. **24**, Amer. Math. Soc. RI, (1999), 397–413.

[15] W. Schwalm, B. Moritz, M. Giota and M. Schwalm, Vector difference calculus for physical lattice models, *Phy. Rev. E* **59** (1999), 1217-1233.