

APLICACION DE LA TRANSFORMADA RAPIDA DE ONDITAS (FWT) EN EL METODO DE LOS ELEMENTOS DE CONTORNO

Miguel Benavente¹, Hugo López Montenegro² y Adrián Cisilino²

¹ Departamento de Matemática
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata
Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina. TE: 54-0223-4752426
e-mail: benavent@mdp.edu.ar

² División Soldadura y Fractomecánica - INTEMA
Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata
Juan B. Justo 4302, 7600 Mar del Plata, Argentina.
TE: 54-0223-4816600 Int. 247 - FAX: 0223-4810046
e-mail: cisilino@fi.mdp.edu.ar, página web: <http://www.intema.fi.mdp.edu.ar/>

Palabras clave: Método de Elementos de Contorno, Transformada Rápida de Onditas, Métodos Iterativos.

Resumen. *El Método de los Elementos de Contorno (BEM) produce matrices densas y no simétricas, cuya resolución es computacionalmente costosa utilizando métodos directos. Esta característica del método torna ineficiente la aplicación del BEM a problemas de gran complejidad geométrica y con un número elevado de grados de libertad.*

En este trabajo se presenta una aplicación de la Transformada Rápida de Onditas (FWT) para la compresión de matrices de BEM. Para tales efectos, se confeccionó un resolvidor que emplea un método iterativo eficiente, en el que se incorporó esta técnica. El resolvidor es a su vez insertado en un código usual del BEM, produciendo cambios mínimos en la formulación original del mismo. La técnica se aplica a tres problemas clásicos de ingeniería frecuentemente resueltos con BEM: el tubo con gradiente térmico radial, la barra rectangular en torsión, y el problema de Motz. Los resultados obtenidos demuestran que para problemas gobernados por la ecuación de Laplace es posible reducir el tiempo de cálculo en varios órdenes de magnitud manteniendo el error en niveles aceptables. Asimismo, ponen de manifiesto la potencia de esta técnica para la solución de problemas de medianas y grandes dimensiones, para los cuales los códigos existentes de BEM se tornan ineficientes.

1 INTRODUCCIÓN

El método de los Elementos de Contorno (BEM) [1], es una técnica eficiente para resolver cierta clase de problemas de valores de frontera, como los que involucran a la ecuación de Laplace. A diferencia de otros métodos, como el de Elementos Finitos o el de Diferencias Finitas, tiene la ventaja de que solo la frontera del dominio es discretizada, reduciendo considerablemente el número de grados de libertad. Como contrapartida, produce sistemas de ecuaciones cuyas matrices de coeficientes resultan en general densas, no simétricas e indefinidas, los cuales son computacionalmente muy costosos de resolver con métodos directos como el de eliminación de Gauss, el cual requiere un esfuerzo de orden $O(N^3)$. Para reducir este esfuerzo varios autores han investigado el desempeño de los métodos iterativos en la resolución de estos sistemas, como se observa por ejemplo en el trabajo de K. Guru Prasad y H. Kane [2], y en el de W.J. Mansur y otros [3]. Surge de estos trabajos que la aplicación de algunos métodos iterativos en las matrices de BEM, como el de bi-gradientes conjugados estabilizado (Bi-CGSTAB) y mínimos residuos generalizados (GMRES), puede tener considerables ventajas sobre los métodos directos al reducir el tiempo de cálculo en un orden, llevándolo a $O(N^2)$.

Existen además técnicas muy eficientes que han logrado reducir el tiempo de cálculo a $O(N \log N)$, o aún a orden $O(N)$ para ciertos casos, pero requieren una completa reformulación del problema, tornando inservibles los códigos existentes (ver G. Beylkin [4]).

Una alternativa diferente, estudiada por D. Bond y S. Vavasis [5] y por H. Bucher y L. Wrobel [6], es suministrada por la aplicación de la transformada rápida de onditas (FWT) en un resolvidor para matrices de BEM, el cual puede ser implementado como una caja negra en los programas existentes, la mayoría de los cuales usan resolvidores directos con eliminación gaussiana. Esta técnica para la compresión de matrices remueve la información geométrica redundante proveniente del campo lejano, reduciendo significativamente el tiempo de cálculo.

En este trabajo se presenta un resolvidor original, que fue incorporado a un código usual de BEM, y su aplicación a tres problemas clásicos de ingeniería estudiados frecuentemente con este método: el tubo con gradiente térmico radial, la barra rectangular en torsión, y el problema de Motz. Como dato adicional, se incluye una comparación del desempeño entre el método iterativo Bi-CGSTAB con preconditionamiento diagonal y sin preconditionamiento, y el método de Gauss con pivoteo por columna en varios problemas resueltos por BEM.

2 LA TRANSFORMADA RAPIDA DE ONDITAS

El objetivo de este trabajo consiste en una aplicación de las onditas de soporte compacto que dan lugar a una base ortonormal de $L_2(R)$ del tipo estudiado por I. Daubechies [7], cuyos órdenes varían desde 2 hasta 10. Estas onditas son modificadas para convertirlas en una base de $L_2[0, N]$, donde N es una potencia entera de 2 (ver S. Mallat, [8]). La estrategia empleada en este trabajo para conseguir este efecto se denomina periodización. Por consiguiente, en esta aplicación las onditas dan lugar a una transformación lineal (FWT) $W: R^N \rightarrow R^N$ como en los trabajos antes citados [5] y [6], donde W es una matriz rala que satisface la condición de ortogonalidad: $W \cdot W^T = I$. En consecuencia, para cada orden de onditas existe una

transformada diferente, con características propias. De esta manera la transformación de un vector f de N componentes es efectuada multiplicando a izquierda por la matriz W para obtener el vector transformado $W \cdot f$, mientras que una matriz A puede experimentar una transformación doble de la forma: $A'' = W \cdot A \cdot W^T$. De esta forma, la ecuación: $A x = b$, se puede transformar en el sistema: $A'' \cdot y = W \cdot b$; $y = W \cdot x$

Es interesante destacar que en la practica la matriz W y su traspuesta nunca son armadas, sino que se utilizan las fórmulas recursivas de la FWT y su inversa como en [5], las que están definidas en función de los coeficientes que representan a la ondita y a la función de escala. De esta manera, el efecto de multiplicar a izquierda por la matriz W es equivalente a aplicarle la FWT a las columnas de la matriz A , y el efecto de multiplicar a derecha por la matriz W^T es equivalente a aplicarle la FWT a las filas de la matriz resultante. Con esta estrategia la transformación inversa sólo se aplica una vez, luego de hallar la solución en el espacio transformado, para recuperar la solución original.

A continuación de lo expuesto, se efectúa la compresión propiamente dicha de la matriz. Esta operación consiste en convertir en cero todos los elementos de la matriz que se encuentran debajo de un determinado umbral, que al igual que el orden de la ondita funciona como un parámetro del programa. Se obtiene así la matriz comprimida A^u definida por:

$$A^u_{ij} = A''_{ij} \text{ si } \text{mod}(A''_{ij}) \geq \varepsilon_j$$

$$A^u_{ij} = 0 \text{ si } \text{mod}(A''_{ij}) < \varepsilon_j$$

Donde: $\varepsilon_j = \varepsilon \cdot \|A''^{(j)}\|$, siendo $\|A''^{(j)}\|$ la norma de la columna j -ésima de A'' y ε un parámetro de entrada que en este trabajo toma los valores 10^{-i} , con $i = 4, 5, 6, 7, 8$.

3 CONSTRUCCIÓN DEL RESOLVEDOR CON BI-CGSTAB

A la fecha, son escasos los artículos publicados que analizan la aplicación de la FWT a las matrices provenientes de BEM, algunos de los cuales ya han sido referenciados en este trabajo. Para poner a prueba el algoritmo de compresión y capitalizar todas las ventajas de la metodología, fue necesario crear un resolvedor robusto que operara con algún método iterativo, adecuado a matrices almacenadas en formato ralo.

Con la transformación bidireccional descrita en el punto anterior (ver [6]), además de lograrse una mayor compresión que en el caso simple unidireccional definido en [5], se preserva la condición de la matriz salvo en lo que se refiere a la pequeña modificación provocada por el proceso de umbralización ya descrito. Así, los resultados de las investigaciones sobre el rendimiento de los métodos iterativos para BEM, debieran ser aplicables luego de la transformación. Con esta premisa se realizó la revisión bibliográfica.

En particular, el método iterativo Bi-CGSTAB, mostró un rendimiento excelente en todas las pruebas a las que fue sometido. En la tabla 1 se registra una comparación entre este método con y sin preconditionamiento, y Gauss con pivoteo parcial, sobre las matrices originales de BEM. Estos registros muestran una coincidencia en alrededor de 9 decimales en el error relativo y un rendimiento muy superior en tiempo de cálculo por parte del método iterativo, que se potencia con la dimensión del problema. Esta situación se hizo más evidente

al aplicar preconditionamiento diagonal al método iterativo, incrementando 2 a 3 veces su velocidad. En todas las pruebas se usó para el método iterativo una tolerancia de $1.0E-9$.

Tabla 1: Resultados para la barra en torsión, comparando con la solución analítica

BARRA EN TORSION		64	256	1024	4096
ERROR RELATIVO	BCG	8.36018E-05	6.81495E-06	5.95776E-05	5.11733E-04
	GAUSS	8.36051E-05	6.81417E-06	5.95786E-05	5.11735E-04
TIEMPO	BCG-PRECOND.	1.60000E-02	1.88000E+00	3.47800E+01	1.15411E+03
	BCG	6.30000E-02	2.76000E+00	9.59060E+01	2.72067E+03
	GAUSS	0.00000E+00	2.23000E+00	1.32770E+02	8.13530E+03

Los resultados para el tubo son análogos a los mostrados en la tabla 1. En el problema de Motz, donde no se cuenta con una solución analítica, la comparación entre los resultados por Gauss y BCG muestra una diferencia relativa inferior a $1.0E-09$

El resolvidor procede en tres etapas. En la primera se efectúa la transformación bidireccional de la matriz usando FWT [6], en la segunda se produce la compactación propiamente dicha de la matriz para diferentes umbrales y su almacenamiento en formato ralo, y en la tercera se resuelve el sistema mediante una adaptación de Bi-CGSTAB sin preconditionamiento para este formato de matrices. En la figura 1 se aprecia el diagrama de flujo del resolvidor. En la tabla 2 se muestra una salida típica del programa para el caso de la placa en torsión para 4096 grados de libertad empleando onditas de diferente orden. El factor de compresión se tomó como el cociente entre el número de elementos nulos y N^2 . El error relativo mide la diferencia entre la solución BCGSTAB sin compactar y la solución compactada para cada umbral, es decir que representa el error atribuible sólo a la compresión.

Tabla 2: Problema de torsión, con 4096 grados de libertad

ONDITA: 2					
UMBRAL	1.00E-04	1.00E-05	1.00E-06	1.00E-07	1.00E-08
ERROR RELATIVO	8.03E-02	2.27E-02	5.28E-03	1.50E-03	1.09E-04
FACTOR DE COMP.	9.82E-01	9.63E-01	9.20E-01	8.36E-01	6.21E-01
TIEMPO	5.13E+01	7.36E+01	1.16E+02	2.14E+02	4.30E+02
ONDITA: 6					
UMBRAL	1.00E-04	1.00E-05	1.00E-06	1.00E-07	1.00E-08
ERROR RELATIVO	7.94E-02	8.29E-03	1.25E-03	9.35E-05	1.53E-05
FACTOR DE COMP.	9.87E-01	9.79E-01	9.69E-01	9.55E-01	8.48E-01
TIEMPO	7.97E+01	8.55E+01	9.51E+01	1.11E+02	2.28E+02
ONDITA: 10					
UMBRAL	1.00E-04	1.00E-05	1.00E-06	1.00E-07	1.00E-08
ERROR RELATIVO	4.63E-02	9.00E-03	6.53E-04	8.60E-05	1.54E-05
FACTOR DE COMP.	9.84E-01	9.76E-01	9.66E-01	9.49E-01	8.41E-01
TIEMPO	1.12E+02	1.20E+02	1.29E+02	1.46E+02	2.75E+02

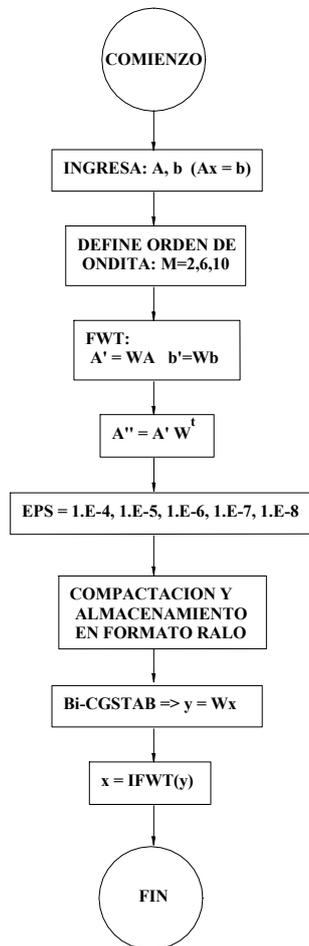


Figura 1: Diagrama de flujo del resolvidor

4. EJEMPLOS ESTUDIADOS

Tres ejemplos clásicos de Ingeniería para los cuales el BEM resulta apropiado, fueron resueltos con la técnica propuesta: el tubo con gradiente térmico radial, la placa rectangular en torsión, y el problema de Motz. Las características y dimensiones de cada problema se detallan a continuación.

4.1 Problema estacionario de conducción de calor en un tubo de pared gruesa

Este ejemplo consiste en un problema de conducción del calor en régimen estacionario en un tubo de pared gruesa con temperaturas constantes u_1 y u_2 en las paredes interior y exterior respectivamente (ver Fig. 2). Las condiciones de simetría permiten considerar sólo un cuarto de la geometría del problema, con las condiciones de contorno apropiadas (ver Fig. 2b).

La solución exacta del problema está dada por la ecuación (1):

$$u = u_1 - \frac{\ln(r / R_1)}{\ln(R_2 / R_1)} (u_1 - u_2) \quad (1)$$

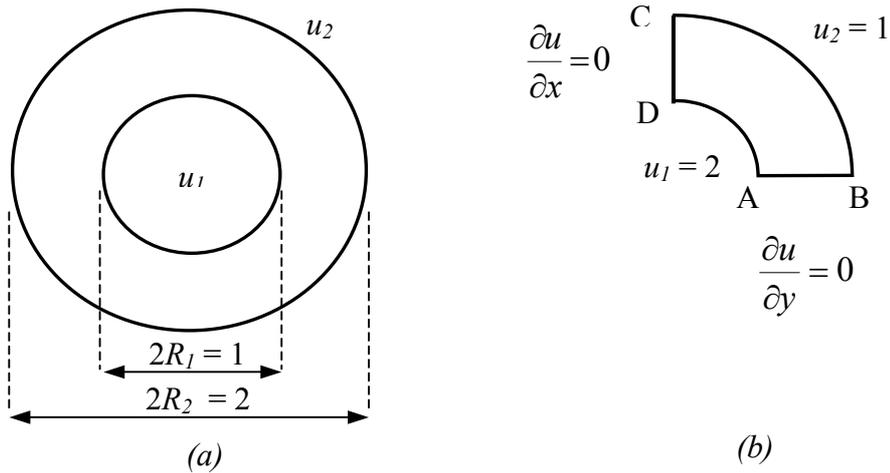


Figura 2: Problema del tubo: (a) geometría, (b) detalles del modelo y condiciones de contorno

El número de nodos y elementos de cada modelo estudiado se detalla en la tabla 3

Tabla 3: Detalle del modelado del tubo para distintos grados de libertad

Nombre del modelo	Número de elementos					Nodos
	AB	BC	CD	DA	Total	
Red 1	6	14	6	6	32	64
Red 2	24	56	24	24	128	256
Red 3	96	224	96	96	512	1024
Red 4	192	448	192	192	1024	2048

4.2 Barra rectangular bajo torsión

La función de deformación de Saint Venant para una barra rectangular bajo torsión es expresada por la ecuación (2). Sólo se requiere modelar un cuarto de la geometría (ver Fig. 3).

$$u = xy - \frac{32a^2}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^3} \frac{1}{\cosh K_n b} \sin K_n x \sinh K_n y \quad (2)$$

$$K_n = \frac{2n+1}{2a} \pi$$

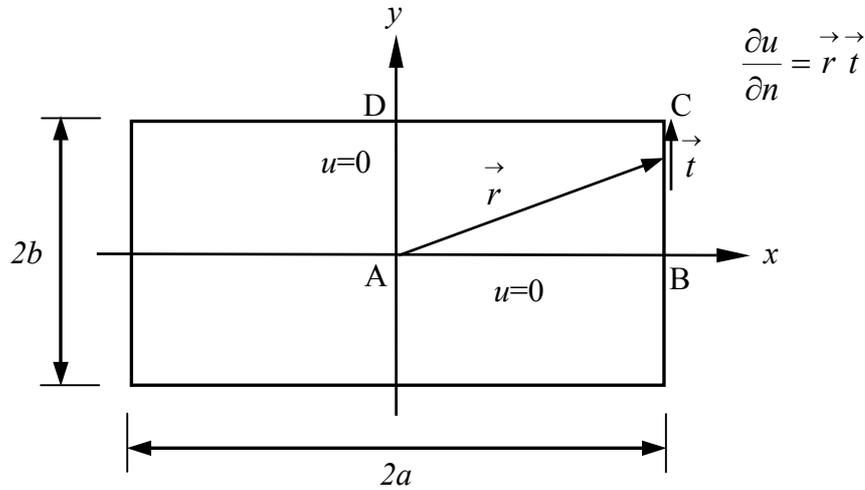


Figura 3: Barra rectangular bajo torsión

La condición de contorno en los lados BC y CD es: $\frac{\partial u}{\partial n} = \vec{r} \cdot \vec{t}$, la cual se deduce de imponer la condición de tracción nula, y que especializada para la geometría analizada sobre el lado BC es: $\frac{\partial u}{\partial n} = y$ y sobre CD es: $\frac{\partial u}{\partial n} = -x$. Las dimensiones son: $a = 3$ y $b = 1$. El número de nodos y elementos de cada modelo se detalla en la tabla 4.

Tabla 4: Detalle del modelado de la barra rectangular para distintos grados de libertad

Nombre del modelo	Número de elementos					Nodos
	AB	BC	CD	DA	Total	
Tor 1	12	4	12	4	32	64
Tor 2	48	16	48	16	128	256
Tor 3	192	64	192	64	512	1024
Tor 4	768	256	768	256	2048	4096

4.3 El problema de Motz

El así llamado problema de Motz posee una singularidad en el punto O donde las condiciones de contorno cambian bruscamente de $u = 0.5$ a $\partial u / \partial n = 0$. Esto se considera como un problema de calibración ('benchmark problem'), útil para ensayar diversos métodos numéricos. En la figura 4 pueden apreciarse los detalles geométricos. La singularidad en la vecindad del punto O es descripta en la literatura especializada por la ecuación (3).

$$u = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j r^{\left(\frac{2j-1}{2}\right)} \cos\left[\left(\frac{2j-1}{2}\right)\theta\right] \quad (3)$$

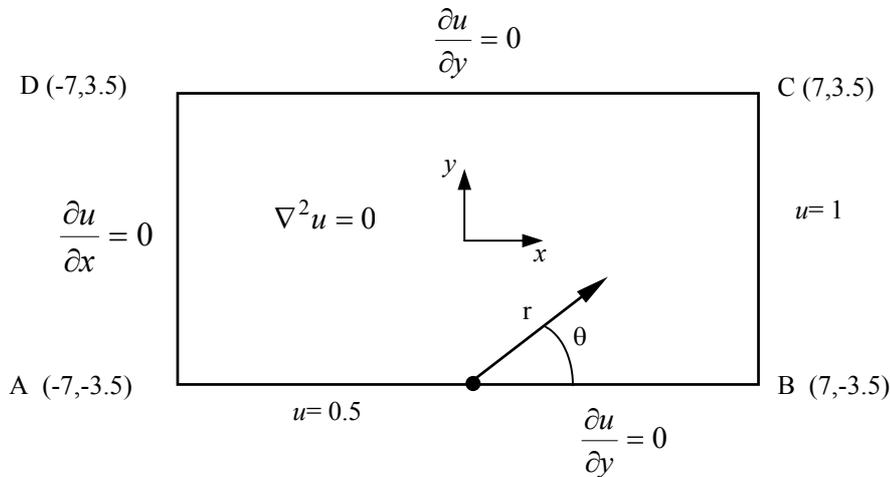


Figura 4: Geometría y condiciones de contorno para el problema de Motz.

El número de nodos y elementos de cada modelo estudiado se detalla en la tabla 5.

Tabla 5: Detalle del modelado del problema de Motz para distintos grados de libertad

Nombre del modelo	Número de elementos					Nodos
	AB	BC	CD	DA	Total	
Motz 1	10	6	10	6	32	64
Motz 2	40	24	40	24	128	256
Motz 3	160	96	160	96	512	1024
Motz 4	640	384	640	384	2048	4096

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

En las figuras 5 y 6 se aprecian las curvas de error relativo y compactación vs. grados de libertad para el caso de la barra rectangular en torsión, con umbrales que van de $1.0E-4$ a $1.0E-8$. Las claves de las figuras 5 a 8 están explicitadas en el primer gráfico de la figura 5.

Los resultados para los otros dos ejemplos, el tubo y el problema de Motz, son similares al anterior. En las figuras 7 y 8 se muestran las curvas relativas a los casos más relevantes; que corresponden a la ondita de orden 6 con umbrales $1.0E-5$ y $1.0E-6$, como puede observarse en la tabla 2. Todos los resultados numéricos se obtuvieron empleando una PC Pentium Xeón de 500 MHz y 1 Gb de memoria RAM, lo cual permitió que todos los modelos se corrieran sin acceder al disco rígido. En caso contrario, la diferencia de desempeño entre los métodos directos e indirectos podrían haber sido considerablemente mayores.

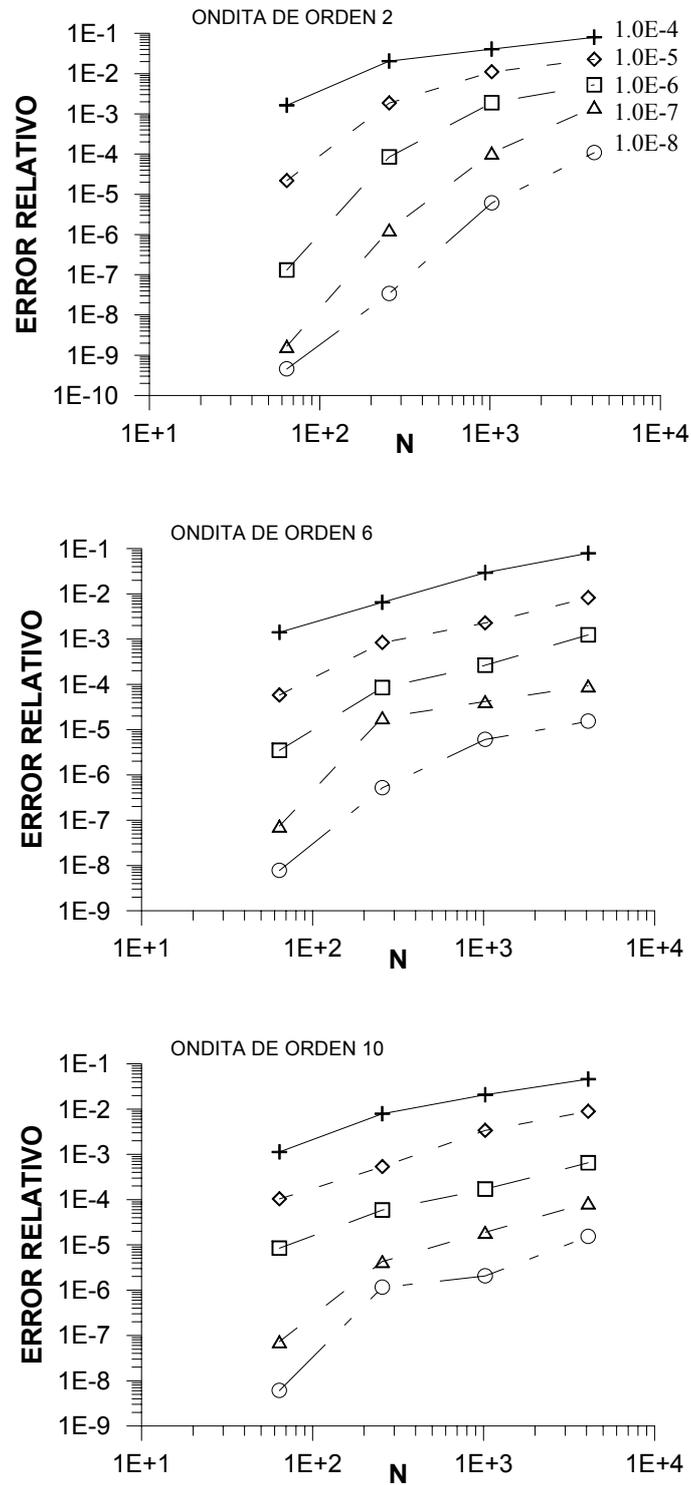


Figura 5: Error relativo para la barra rectangular bajo torsión para onditas de diferente orden.

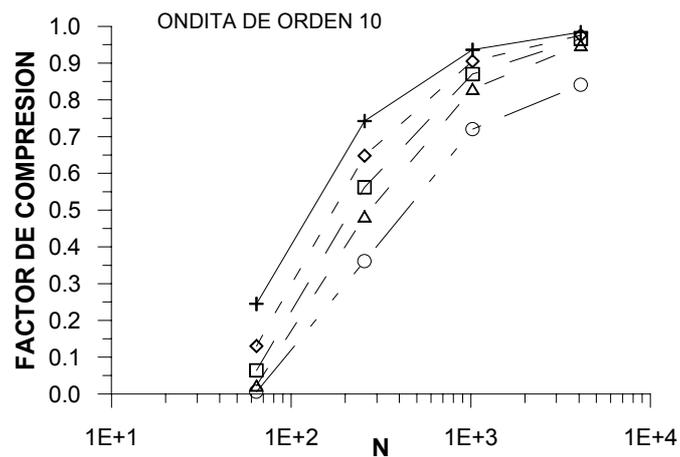
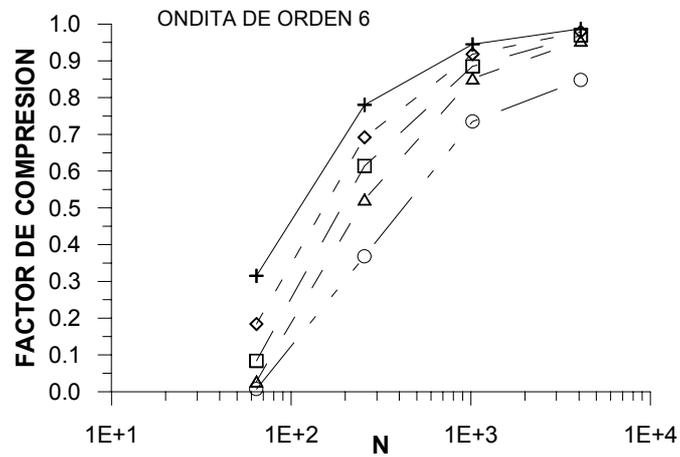
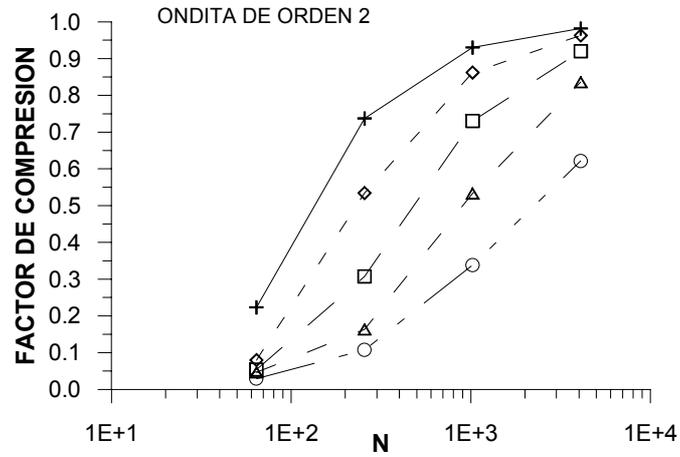


Figura 6: Compactación en la barra rectangular bajo torsión para diferente orden de ondita y umbral.

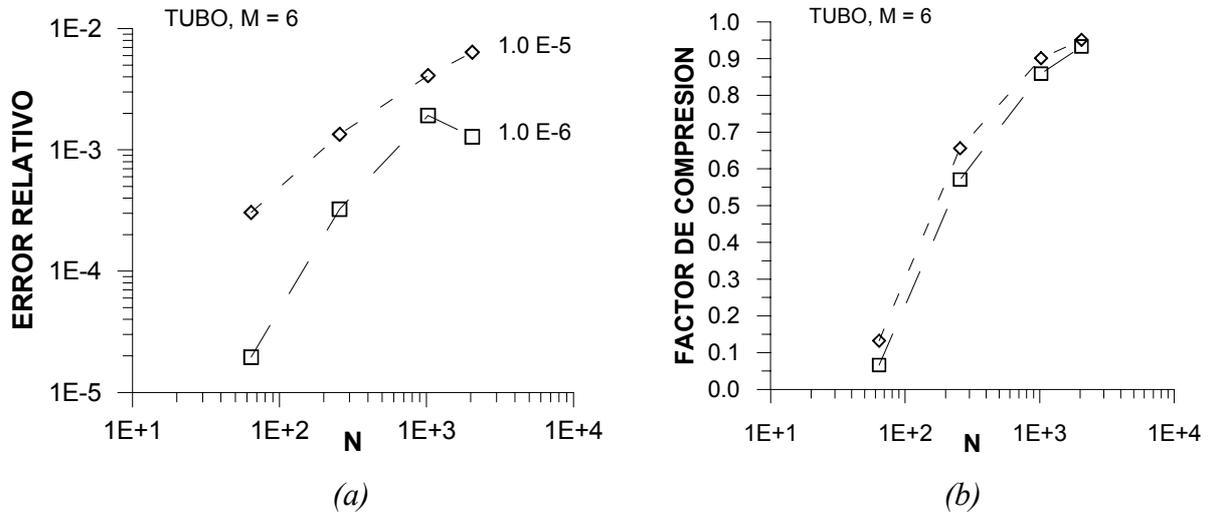


Figura 7: Caso del tubo para ondita de orden 6 y umbrales 1.0×10^{-5} y 1.0×10^{-6} ; a) error relativo, b) compresión

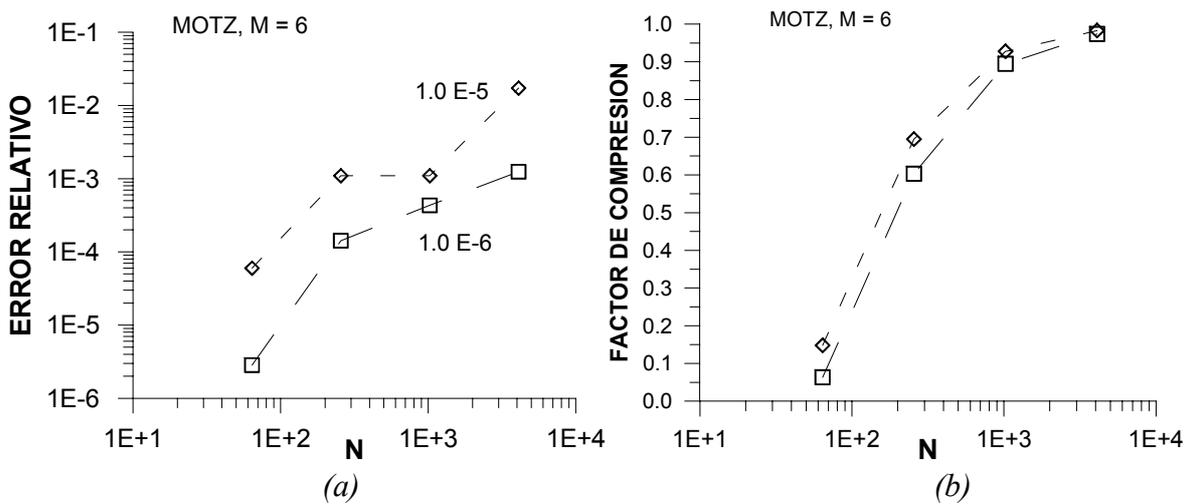


Figura 8: Caso de Motz para ondita de orden 6 y umbrales 1.0×10^{-5} y 1.0×10^{-6} ; a) error relativo, b) compresión

En la figura 9 se muestran los tiempos de proceso aplicando los métodos de resolución directo, iterativos y el de compresión presentados en este trabajo, y la proyección del ejemplo de la barra en torsión a $65536 (2^{16})$ grados de libertad.

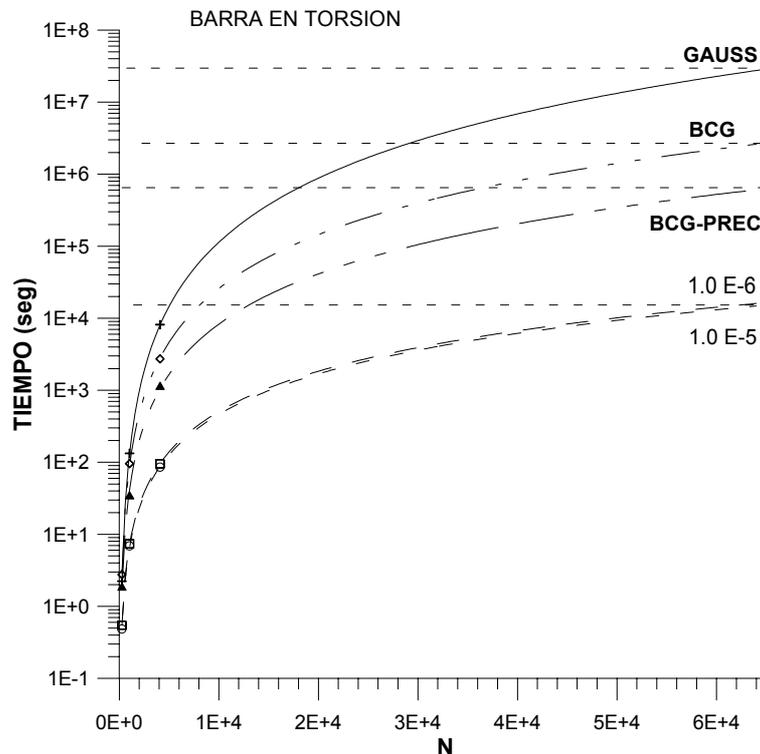


Figura 9: Tiempo de proceso para la barra en torsión para ondita de orden 6 y umbrales $1.0 \text{ E-}5$ y $1.0 \text{ E-}6$, comparado con métodos directo e iterativo sin compresión

6 CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó la confección de un resolvidor que utiliza un método iterativo eficiente para matrices surgidas de aplicar método de elementos de contorno, que incluye la compresión de dichas matrices mediante la transformación bidireccional empleando la transformada rápida de onditas.

Como se esperaba, la compactación de la matriz no desmejoró el desempeño del método iterativo propiamente dicho. Respecto de las bases empleadas en la FWT, los experimentos realizados muestran un mejor desempeño de las onditas de orden 6 y 10, en consonancia con el hecho que los ejemplos estudiados presentan geometrías simples y condiciones de contorno en general suaves.

En lo que hace al parámetro de umbral, con los valores de $1.0\text{E-}5$ y $1.0\text{E-}6$ se consiguieron resultados altamente satisfactorios, considerando un compromiso entre compresión y distanciamiento de la solución. Con los valores antedichos se lograron ganancias impresionantes en la reducción del tiempo de cálculo, manteniendo el error en niveles muy bajos. En el caso de la placa en torsión con 4096 grados de libertad, se consiguió una compresión cercana al 97% con un distanciamiento de la solución del sistema compactado respecto del sistema sin compactar, del orden de $6.0\text{E-}4$, apenas superior al error inherente a la discretización misma. Este nivel de compactación redundó en un aumento en la velocidad

de cálculo superior a 20 veces la velocidad del iterativo puro y de más de 60 veces con respecto a Gauss con pivoteo parcial. Como puede apreciarse en la figura 9, con una proyección a un problema con 2^{16} incógnitas para la barra en torsión, el tiempo de cálculo resultó para los distintos métodos; de aproximadamente 4 horas para el resolvidor, 7,5 días para el iterativo con preconditionamiento diagonal, 29 días para el iterativo y 350 días para el método de Gauss.

El preconditionamiento diagonal en la matriz sometida a compresión no mostró una tendencia definida en cuanto a la reducción del tiempo de proceso en los ejemplos estudiados, por lo cual la aplicación de aceleradores en matrices comprimidas sigue siendo materia de análisis.

Un leve comportamiento errático se observa en las curvas de error en los gráficos 7(a) y 8(a). Esto pueden deberse al hecho de que los modelos adoptados, al ser sobredimensionados con el fin de que sirvan a los propósitos de este trabajo, agregan información redundante y posiblemente provocan un deterioro de la condición de la matriz, cuando los problemas abordados pueden resolverse satisfactoriamente con pocos grados de libertad.

Finalmente, los resultados obtenidos permiten esperar un buen desempeño de la metodología expuesta en problemas ingenieriles de mayor complejidad.

7 AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer el soporte financiero del proyecto CAPES/SECYT 48/03 “Modelado de micromecanismos de falla en materiales compuestos”, y al Dr. R.A. Zalik de la Universidad de Auburn por su constante provisión de material bibliográfico actualizado.

8 REFERENCIAS

- [1] C.A. Brebbia and J. Dominguez, *Boundary elements. An introductory course*, McGraw Hill, (1992).
- [2] K. Prasad, J. Kane, D. Keyes and C. Balakrishna, “Preconditioned Krylov solvers for BEA”, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **31**, 1651-1672 (1994).
- [3] W. Mansur, F. Araujo and J. Malaghini, “Solution of BEM systems of equations via iteratives techniques.”, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **33**, 1823-1841 (1994).
- [4] G. Beylkin, R. Coifman and V. Rokhlin, “Fast wavelet transforms and numerical algorithms”, *Commun. Pure and Applied Math*, 44, 141-183 (1991).
- [5] D. Bond and S. Vavasis, “Fast wavelet transforms for matrices arising from boundary element methods”, Technical Report, Center for Applied Mathematics, Eng. and Theory Center, Cornell University, New York, 174, 1994.
- [6] H. Bucher and L. Wrobel, “A Novel Approach to Applying Fast Wavelet in the Boundary Element Method”, *Advances in Boundary Element Techniques II*, Proceedings, 16-18 July 2001, Rutgers University, New Jersey, USA.
- [7] I. Daubechies, *Ten Lectures on Wavelets*, SIAM, Philadelphia, 1992.
- [8] S. Mallat, *A Wavelet Tour of Signal Processing*, Academic Press, 1997.