

ELEMENTOS FINITOS NOCONFORMES PARA LA ECUACIÓN DE HELMHOLTZ: ¿DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIO ITERATIVA O SOLUCIÓN GLOBAL?

Patricia M. Gauzellino* and Fabio I. Zyserman†

*Fac. de Cs. Astronómicas y Geofísicas,
Universidad Nacional de La Plata,
Paseo del Bosque s/n, (1900), La Plata, Argentina
e-mail: gauze@fcaglp.unlp.edu.ar

†CONICET, Fac. de Cs. Astronómicas y Geofísicas,
Universidad Nacional de La Plata,
Paseo del Bosque s/n, (1900), La Plata, Argentina
e-mail: zyserman@fcaglp.unlp.edu.ar

Palabras Claves: Elementos finitos, descomposición de dominios, sistema de ecuaciones lineales, ecuación de Helmholtz.

Abstract. *Los métodos de elementos finitos no conformes iterativos para la ecuación de Helmholtz aparecieron como solución a los siguientes problemas: por un lado no existía un algoritmo eficiente para resolver el sistema lineal grande y ralo -que surge de la discretización del problema global- cuya matriz de coeficientes no es definida positiva, y por otro los métodos de descomposición de dominio conducen a matrices de coeficientes pequeñas, pero en el caso de elementos conformes fuerzan a la transmisión de un gran número de datos entre dominios. Actualmente hay algunos solvers globales disponibles, por lo que en este trabajo comparamos -para el caso de un dominio computacional tridimensional- la eficiencia computacional de ambas técnicas (global y de descomposición de dominio) y analizamos qué rol juega el tamaño de los dominios de la descomposición. El análisis muestra que el método iterativo de descomposición de dominio es claramente superior a la resolución global y el problema de éste último reside en los solvers disponibles.*

1. INTRODUCCIÓN

En este trabajo hablaremos sobre un método de elementos finitos no conformes (EFNC), utilizado para resolver la ecuación de Helmholtz en dominios tridimensionales. Distintas variantes de los EFNC fueron presentadas por Douglas et al.^{1,2}; algunas de ellas han sido implementadas en aplicaciones geofísicas^{3,4}.

En particular nos abocaremos a comparar dos implementaciones de estos EFNC: descomposición de dominio (IDD) y global (IG), en versión serie y paralela.

La IDD es un método iterativo que converge a la solución de elementos finitos global, y tal como fue formulada, es “naturalmente paralelizable” en el sentido que es fácil y barato -relativamente bajo intercambio de datos- implementarlo en un ambiente con muchos procesadores. Fue la variante elegida en los trabajos^{3,4}.

Trataremos distintas versiones de la IDD, variando el tamaño de los dominios involucrados en la descomposición. El dominio más pequeño considerado coincide con un elemento finito¹; el mayor es la mitad del dominio de resolución total. En el primer caso el sistema lineal a resolver en cada dominio (cuyo número total coincide, claramente, con el número de elementos) es de orden igual al número de grados de libertad en el elemento, que es seis. Estos sistemas son resueltos usando un método LU standard.

Cuando los dominios incluyen varios (o muchos) elementos utilizamos el mismo “solver” que para la IG; aunque esta opción puede resultar ineficiente cuando el número de elementos por dominio es pequeño, hace más simple al código; además, éste no es un caso relevante.

Aquí debe tenerse en cuenta que la matriz de coeficientes del sistema lineal que surge de la aplicación de un método de elementos finitos a la ecuación de Helmholtz no es definida positiva, por lo tanto debe utilizarse un solver directo, al igual que en el caso de un elemento finito por dominio. Ahora, tanto en la IG como en el caso de dominios con muchos elementos la matriz es, además de compleja y no definida positiva, grande y rala. Esta conjunción hace que no sean muchos los algoritmos disponibles para resolver el problema lineal. En este trabajo comparamos tres solvers: el paquete de Yale⁵, que es una implementación del método LU, el ME48⁶ que implementa una variante de eliminación de Gauss y SPOOLES⁷, implementando una variante de LU. Los dos primeros solvers son para resolución en serie y están disponibles en FORTRAN; el último permite resolución en serie y en paralelo y está escrito en C.

El trabajo está organizado como sigue: en la próxima Sección presentamos el problema modelo y su formulación; en la Sección 3 explicamos con más detalle la descomposición de dominio y el método iterativo que surge de su utilización. En la Sección 4 mostramos los resultados obtenidos al comparar todas las variantes implementadas, y por último, en la sección 5, presentamos las conclusiones.

¹A lo largo de este trabajo utilizaremos los términos elemento o elemento finito tanto para designar al método de discretización como a la unidad de la partición del dominio computacional; la acepción correcta surge claramente del contexto.

2. MODELO MATEMÁTICO

Hemos elegido como dominio de resolución las coordenadas espaciales y la frecuencia temporal por entender que representa el sistema de coordenadas natural para el tratamiento de problemas de atenuación y dispersión. Si llamamos $\hat{p}(\vec{x}, \omega)$ a la transformada de Fourier de la presión, el problema de propagación de ondas viscoacústicas en un dominio tridimensional Ω con frontera Γ se formula matemáticamente de la siguiente forma:

Hallar $\hat{p}(\vec{x}, \omega)$ tal que cumpla la ecuación

$$\frac{-\omega^2 \hat{p}(\vec{x}, \omega)}{K(\vec{x}, \omega)} - \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho(\vec{x})} \nabla \hat{p}(\vec{x}, \omega) \right) = \hat{f}(\vec{x}, \omega), \quad \vec{x} \in \Omega, \quad \omega \in R \quad (1)$$

con condición de borde

$$\frac{\partial \hat{p}(\vec{x}, \omega)}{\partial \nu} + i \omega \alpha(\vec{x}, \omega) \hat{p}(\vec{x}, \omega) = 0, \quad \vec{x} \in \Gamma \quad \omega \in R. \quad (2)$$

En esta ecuación de movimiento, $K(\vec{x}, \omega)$ es el módulo de volumen complejo del medio y $\rho(\vec{x})$ su densidad. $\hat{f}(\vec{x}, \omega)$ representa la transformada de Fourier de la fuente externa y en la condición de borde absorbente se impone que Γ sea transparente para las ondas que llegan normales al mismo, siendo ν su normal exterior y α un coeficiente complejo que depende de la velocidad, pudiendo encontrar su desarrollo en⁸. Al proponer trabajar en el dominio espacio-frecuencia, esta ecuación se resuelve para cada frecuencia en particular y para un número finito de ellas, determinado por el contenido en frecuencias que presenta el espectro de la fuente, es decir, resolvemos un conjunto de problemas elípticos con condición de borde absorbente y luego, la solución en el dominio espacio-tiempo se calcula mediante transformada inversa de Fourier. La forma variacional asociada a este problema se enuncia:

Hallar $\hat{p}(\vec{x}, \omega) \in [H^1(\Omega)]^3$ tal que

$$\left(\frac{-\omega^2}{K(\vec{x}, \omega)} \hat{p}, \varphi \right) + \left(\frac{1}{\rho(\vec{x})} \nabla \hat{p}, \nabla \varphi \right) + i \omega \left\langle \frac{\alpha(\vec{x}, \omega)}{\rho(\vec{x})} \hat{p}, \varphi \right\rangle_{\Gamma} = (\hat{f}, \varphi), \quad \varphi \in H^1(\Omega), \quad (3)$$

donde hemos usado (\cdot, \cdot) y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ para indicar los productos internos complejos $[L^2(\Omega)]^3$ y $[L^2(\Gamma)]^3$, respectivamente.

3. DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIO

La descomposición de dominio divide el dominio total de resolución en dominios más pequeños y resuelve en cada uno de ellos el problema de Helmholtz de manera “independiente” al resto. Las comillas expresan que la contribución de los dominios vecinos se manifiesta en una modificación del lado derecho de la ecuación. Luego, los resultados locales obtenidos deben ser considerados en conjunto, dando lugar a un procedimiento iterativo que concluye en el resultado global. Por supuesto que los contactos entre los dominios deben cumplir con una condición cinemática, continuidad en los desplazamientos y una condición dinámica, continuidad en las

tensiones, pudiéndose combinar ambas y quedar representadas mediante condiciones equivalentes tipo Robin. Estas restricciones en los bordes interdominio se expresan introduciendo multiplicadores de Lagrange, λ , dando lugar a una variante híbrida del algoritmo IDD:

A partir de valores iniciales $(\hat{p}^0, \lambda^0, \lambda_*^0)$ donde el supraíndice indica iteraciones y el subíndice *, valores correspondientes para el elemento vecino; calcular (\hat{p}^n, λ^n) como solución de

$$\left(\frac{-\omega^2}{K(\vec{x}, \omega)} \hat{p}^n, \varphi \right) + \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}^n, \nabla \varphi \right) + i\omega \left\langle \left\langle \frac{\alpha}{\rho} \hat{p}^n, \varphi \right\rangle \right\rangle_{\Gamma_{\text{externo}}} + \sum_k \langle \langle \lambda^n, \varphi \rangle \rangle_{\Gamma_{\text{interdominio}}} = (\hat{f}, \varphi), \quad \varphi \in NC, \quad (4)$$

$$\lambda^n = -\lambda_*^{n-1} + i\beta[\hat{p}^n - \hat{p}_*^{n-1}], \quad \text{sobre } \Gamma_{\text{interdominio}} \quad (5)$$

donde β es una matriz definida positiva sobre los bordes interdominio (para mayor detalle ver³).

En el trabajo de Douglas² se demostró que la solución aproximada obtenida mediante descomposición de dominio tiende a la solución del método global no conforme de Galerkin según aumenta el número de iteraciones.

Con estas ideas hemos desarrollado un código computacional basado en una descomposición de dominio iterativa combinada con elementos finitos cúbicos no conformes¹. De este modo, la IDD evita la construcción, almacenamiento y solución de sistemas lineales significativamente grandes que están asociados con las técnicas de elementos finitos globales. Con respecto a los elementos finitos no conformes, hemos estudiado sus propiedades dispersivas para resolver la ecuación que tratamos en este trabajo y observamos que introducen menos dispersión y anisotropía numérica que el método conforme para el mismo orden de aproximación espacial, permitiendo trabajar con menos de diez puntos por longitud de onda y manteniendo los errores relativos en valores razonables. Además, en vistas a la implementación paralela de estos algoritmos, es posible reducir en un factor de dos la cantidad de información transmitida entre procesadores. Pueden consultarse los artículos^{4,9}.

4. ESTRATEGIAS DE RESOLUCIÓN

Para llegar a responder la pregunta - ¿ IDD o IG ? - hemos implementado por un lado la solución global que resulta luego de discretizar la ecuación 3 y diferentes algoritmos para estrategias de resolución que van aumentando el tamaño de los dominios en la descomposición desde una descomposición masiva, resolviendo en cada dominio un sistema lineal de seis ecuaciones con seis incógnitas (valores de presión en los centros de las seis caras del cubo, es decir, los puntos nodales) hasta dominios que corresponden a la mitad del total de elementos y que provienen de la discretización de las ecuaciones 4 y 5. Además, como cada dominio, independientemente de su tamaño, usa información proveniente de sus vecinos vía condiciones de borde de Robin, se ordenan los cálculos de forma tal de usar dicha información luego de ser actualizada: imaginando un tablero de ajedrez con casillas negras y rojas, primero se resuelven las ecuaciones en las casillas negras, usando información de sus vecinas rojas. Luego, se actualizan los multiplicadores de Lagrange y con esta información actualizada (solución más multiplicadores) se

<i>Nº de dominios</i>	<i>Nº de elementos por dominio</i>	<i>Nº de incógnitas por dominio</i>	<i>Iteraciones</i>	<i>Tiempo relativo</i>
32768	1	6	115	1.0
1024	32	161	73	0.9
256	128	516	28	6.3
64	512	1808	23	2.6
16	2048	6720	26	11.3
4	8192	25856	29	75.6
2	16384	51200	—	—

Cuadro 1: Número de iteraciones y tiempo de CPU para el problema de Helmholtz con distintas implementaciones.

procede a idéntico cálculo en las casillas rojas. Finalmente, se realiza relajación de la solución y los multiplicadores para la totalidad del conjunto de elementos.³ Este esquema “negro-rojo” ha permitido obtener buenos resultados, prácticamente redujo los tiempos de CPU a la mitad.

Como todo problema con derivadas parciales que se trata de resolver en forma numérica, luego de la discretización de las ecuaciones 3 ó 4-5, se llega a un problema algebraico. En el caso que nos ocupa, propagación de ondas en el dominio espacio-frecuencia, deberemos resolver un sistema complejo de ecuaciones lineales $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$, donde la matriz \mathbf{A} es una matriz no definida positiva. Esta característica restringe notablemente la utilización de algoritmos de resolución disponibles para el caso IDD con dominios involucrando muchos elementos. Como fue adelantado hemos usado y comparado las subrutinas de la Universidad de Yale, ME48 y SPOOLES, todas ellas implementadas para matrices ralas y métodos directos de resolución. Para resolver sistemas entre mil y dos mil incógnitas, los tiempos de las rutinas de Yale son incapaces de competir con las otras dos restantes y entre estas últimas, SPOOLES resuelve una vez y medio más rápido que ME48 y además es capaz de resolver con éxito sistemas con mayor número de incógnitas. Los ejemplos siguientes se implementaron con la rutina ME48 debido a su escritura en FORTRAN. Sin embargo, la IG se realizó con la rutina SPOOLES por lo señalado anteriormente y además, por permitir resolución en paralelo.

4.1. RESULTADOS

La tabla 1 muestra los tiempos de CPU obtenidos al resolver la ecuación de Helmholtz en un medio elástico, homogéneo, una grilla de 32x32x32 elementos y una única frecuencia, correspondiente a la mayor contribución de la fuente externa. Todas estas pruebas se realizaron en una máquina IBM SP/2 con nodos de cuatro procesadores Power 3-II de 375 Mhz y con 4 GB de memoria.

El número de iteraciones en IDD queda determinado por la restricción de que la solución difiera de la global en menos del 2%. Notar también que para facilitar la lectura de la tabla hemos escrito tiempos relativos, donde 1 es 1.6 minutos. No se indica el tiempo de CPU que superó un límite de tiempo fijado en 7.00 horas.

<i>N° de dominios</i>	<i>N° de elementos por dominio</i>	<i>N° de incógnitas por dominio</i>	<i>Iteraciones</i>	<i>Tiempo relativo</i>
110592	1	6	182	1.0
2304	48	241	105	0.8
262144	1	6	243	1.0
4096	64	321	132	0.7

Cuadro 2: Número de iteraciones y tiempo de CPU para el problema de Helmholtz refinando la grilla.

<i>Implementación</i>	<i>Tiempo(1 procesador)</i>	<i>Tiempo(4 procesadores)</i>	<i>Tiempo(16 procesadores)</i>
IDD	1.6	0.96	0.25
ITIRAS	1.44	0.34	0.09
16 TIRAS (4 × 4)	4.16	0.55	0.12

Cuadro 3: Número de procesadores y tiempo de CPU, distintas versiones de la descomposición de dominio.

Si sólo refinamos la grilla para 48x48x48 elementos (77824 elementos nuevos) y para 64x64x64 elementos (229376 elementos nuevos), los resultados obtenidos se indican en la tabla 2 para la IDD y el esquema que integra la totalidad de los elementos en una dirección (ITIRAS). En estos ejemplos el tiempo relativo 1 corresponde a 7.8 minutos y 24.4 minutos, respectivamente.

De los resultados obtenidos en la Tabla 1, resulta natural comparar el comportamiento de las implementaciones en paralelo para la IDD, la ITIRA y la versión más favorable de bloques de mayor tamaño, correspondiente a la unión de 16 tiras, en un bloque de 4 tiras por lado. La tabla 3 muestra los tiempos en minutos para un total de 32768 elementos.

También obtuvimos tiempos correspondientes a la resolución paralela del problema global, posibilidad presente con SPOOLES; en este caso su implementación es ajena a nosotros y es utilizada como caja negra. Los tiempos de CPU en función del número de procesadores se muestran en la Tabla 4.

5. CONCLUSIONES

Hemos implementado métodos de EFNC para resolver la ecuación de Helmholtz en dominios tridimensionales: IDD e IG. Analizamos el comportamiento para distintos tamaños de dominios en el caso IDD involucrando desde un elemento hasta la mitad de los elementos del

<i>Implementación</i>	<i>Tiempo(1 procesador)</i>	<i>Tiempo(4 procesadores)</i>	<i>Tiempo(8 procesadores)</i>
IG	43.74	31.89	28.16

Cuadro 4: Número de procesadores y tiempo de CPU, solución global.

dominio total. En todos los casos, la ITIRA resolviendo en serie y en paralelo resultó ser superior al resto.

REFERENCIAS

- [1] J. Douglas Jr., J. Santos, D. Sheen, and X. Ye. Nonconforming Galerkin methods based on quadrilateral elements for second order elliptic problems. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, **33**, 744 (1999).
- [2] J. Douglas Jr., J. Santos, and D. Sheen. Nonconforming Galerkin methods for the Helmholtz equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, **17**, 475–494 (2001).
- [3] P. Gauzellino. Simulación numérica de fenómenos de propagación de ondas en medios dispersivos. *Fac. Cs. Astronómicas y Geofísicas, UNLP*, (1999).
- [4] P. Gauzellino, J. Santos, and D. Sheen. Frequency domain wave propagation modeling in exploration seismology. *Journal of Computational Acoustics*, **9**, 941–955 (2001).
- [5] S. C. Eisenstat, M. C. Gursky, M. H. Schultz, and A. H. Sherman. Yale sparse matrix package I: the symmetric codes. *IJNME*, **18**, 1145–1151 (1982).
- [6] I.S. Duff and J.K. Reid. Me48 - package specification. Technical report, HSL, (2004). available, with restrictions, from <http://hsl.rl.ac.uk>.
- [7] C. Ashcraft, D. Pierce, D.K. Wah, and J. Wu. An object oriented software library for solving sparse linear systems of equations. Technical report, Boeing Computer Services, (1999). available from www.netlib.org.
- [8] C. L. Ravazzoli and J. E. Santos. Consistency analysis for a model for wave propagation in anelastic media. *Latin american applied research*, **25**, 141–151 (1995).
- [9] F. Zyserman and P. Gauzellino. Dispersion analysis of a nonconforming finite element method for the three dimensional scalar and elastic wave equations. *Finite Elements in Analysis and Design*, **41**, 1309–1323 (2005).