Encuentro de Jóvenes Investigadores

ANÁLISIS DE UN CÓDIGO COMPUTACIONAL PARA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS MECÁNICOS MULTIESCALA CONSIDERANDO LA APLICACIÓN DE MÉTODOS ITERATIVOS

LUCAS, HERNANDEZ

Centro de investigación de métodos computacionales (CIMEC), FICH-UNL

Director: Toro, Sebastian
Codirector: Rios, Gustavo
Área: Ingeniería

Palabras claves: Multiescala, Condiciones de borde, Sistemas de ecuaciones.

INTRODUCCIÓN

Las formulaciones multiescala son una poderosa herramienta de modelado, brindando un marco teórico general y riguroso capaz de describir el comportamiento complejo de materiales heterogéneos y extendiendo la funcionalidad del conocido método de elementos finitos (ampliamente usado en el modelado de problemas mecánicos). Debido a las características del problema multiescala y su resolución numérica, se debe dar solución a varios sistemas de ecuaciones lineales (SEL). A esto se le suma el hecho de que en varios problemas de aplicación se deben utilizar mallas muy finas, lo cual implica que el SEL del problema de la microescala sea grande y por lo tanto su resolución adquiera cada vez más relevancia en el tiempo de cálculo total del problema. Estas dimensiones del sistema obligan a abandonar el uso de métodos directos para la solución de estos SEL (debido a un mayor tiempo de cálculo y consumo de memoria RAM) y adoptar métodos iterativos (MI).

OBJETIVOS

- Implementar las condiciones de borde multiescala en los códigos preexistentes.
- Encontrar relaciones entre las características de las matrices de rigidez y las condiciones de borde multiescala.
- Introducir mejoras en la etapa de resolución de los sistemas de ecuaciones lineales debido a la importancia de esta en el tiempo total de cálculo.
- Implementación del esquema iterativo en la resolución de sistemas de ecuaciones.

Título del proyecto: Análisis y mejora de rendimiento de un código computacional para la solución de problemas mecánicos multiescalas con la técnica FE² considerando la aplicación de métodos iterativos en la solución de sistemas lineales
Instrumento: Cientibeca
Año convocatoria: 2019
Organismo financiador: UNL
Director: Toro, Sebastian, CoDirector: Ríos, Gustavo

Federación Universitaria del Litoral
UNL UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

METODOLOGÍA

En una primera etapa se pretendió lograr un entendimiento teórico del problema multiescala (Feyel, 2000; Toro, 2014) y de los desafíos que este presenta, así como también familiarizarse con el uso de funciones avanzadas de MATLAB logrando extender la funcionalidad de los códigos existentes provistos por los directores. Para esto se implementó en el código las condiciones de borde multiescala, como Lineales (L), Periódicas (P) y de Mínima Restricción (MR). Esto se hizo utilizando dos técnicas de aplicación de las mismas, Condensación Estática (CE) y Multiplicadores de Lagrange (ML).

Para la siguiente etapa (y los posteriores análisis), se trabajó sobre un caso sencillo de estudio, constituido por un dominio cuadrado con un agujero en el centro discretizado con el método de elementos finitos (Zienkiewicz, 2006). Se analizó diferentes tamaños de malla para cada condición de borde, buscando determinar relaciones entre estas y las características matriciales que presenta el problema multiescala. Dentro de la información a explorar se encuentra: patrón de dispersión, número de condición, espectro de autovalores, ancho de banda, entre otros (Golub, 2013). Cabe aclarar que este análisis se realizó tanto para CE como para ML.

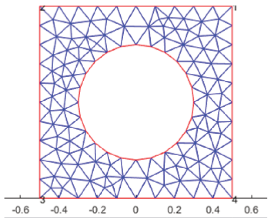

Figura 1: Microcelda de estudio

Finalmente, se pretendió mejorar globalmente el código utilizando las conclusiones encontradas en la etapa previa, estas mejoras pueden provenir del tipo de método que se utiliza (directo/iterativo), de mejoras propias de las características como el número de condición o el ancho de banda, o de cuestiones generales del funcionamiento del código donde se puedan encontrar optimizaciones.

Implementaciones adicionales al código

En el caso de las técnicas multiescala se añadió por un lado la condición de borde L, la cual es la más cercana a un problema mecánico elástico típico ya que se basa en restringir el movimiento de cuerpo rígido de los nodos de frontera. Por eso se lo considera como referencia para analizar la influencia de las demás condiciones de borde (P y MR) en la solución del SEL. La correcta programación de estas condiciones se realizó comprobando los valores del tensor constitutivo que obtenemos al ejecutar el código. Una vez hecho esto se procedió a aplicar las condiciones de borde mediante ML, una técnica que introduce ecuaciones en el sistema global, verificando que los resultados coinciden con los obtenidos previamente.

Etapas críticas y métodos iterativos.

Para analizar las etapas críticas del código se midieron los tiempos de cálculo de cada sección. En todas las pruebas realizadas la etapa de resolución del SEL es la que mayor tiempo consume, lo cual es esperable basándose en la teoría de métodos numéricos para el tamaño de malla de interés en este análisis. También se realizó una comparación en tiempo de resolución del SEL utilizando diversos métodos directos y un método iterativo (en este caso gradiente conjugado), a fin de determinar para qué tamaños de malla resulta más apropiado optar por métodos iterativos a la hora de resolver estos sistemas de ecuaciones.

Mejoras en la topología

Se analizó cómo se encuentran distribuidos los valores dentro de la matriz, es decir se observa la magnitud de los valores máximos y mínimos, cantidad de entradas no nulas, dónde se encuentran concentrados la mayor parte de dichas entradas, etc. Pudo concluirse que el hecho de usar MR (debido a que su formulación relaciona todos los nodos de frontera) genera bloques con gran densidad de elementos no nulos en la matriz. En el caso de la condición P el efecto es menor, pero se observa que hay un leve cambio de la estructura de la matriz con respecto a la L (además del ancho de banda). En vista de esto y considerando las consecuencias que esto puede generar a los métodos iterativos, se buscó mejorar esta distribución (usando como métrica el ancho de banda) mediante algoritmos de reordenamiento. En la Fig. 2, puede verse que el ancho de banda (BandWidth) mejora notablemente en cada caso. Se espera que esto luego ayude a aumentar la velocidad de resolución de los métodos iterativos a analizar.

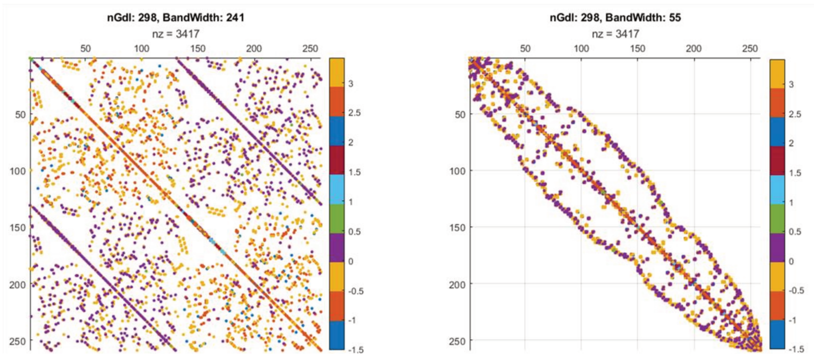

Figura 2: Topología de matriz (P) antes y después de aplicar reordenamientos.

Evolución del número de condición

El segundo tipo de análisis se basa en los autovalores de las matrices de rigidez. Se observaron los máximos, mínimos y su distribución. Esto último teniendo en cuenta que en general los MI convergen en menos iteraciones cuando los autovalores se encuentran agrupados y no distribuidos uniformemente en el espectro. También se determina el número de condición (NC) de las matrices obtenidas, ya que este valor está relacionado a la dificultad de resolver un SEL con un MI, ya que existen cotas teóricas basadas en dicho número para la mayoría de los MI (Kelley, 1995; Saad, 2003; Shewchuk, 1994). Adicionalmente se estudia la variación del NC de la matriz de rigidez en función del tamaño de la malla. Es conocido que el NC en un problema (elíptico) de elementos finitos (EF) crece con el tamaño de la malla. En el eje de abscisas de las Fig. 3 se indica el (logaritmo) tamaño máximo de todos los lados de los EF de la malla (HMaxEF) y en las ordenadas el (logaritmo) del NC de la matriz de rigidez correspondiente. Lo primero que se observa es que, para un mismo tamaño de la malla, el NC para las matrices obtenidas con la condición de borde P es mayor que con la L (un poco más de un orden de magnitud). A su vez, en el caso con MR, los autovalores son bastante mayores que para las otras dos condiciones de borde (más de 4 órdenes mayores con respecto al L).

En la Fig. 3 se evidencia que no solo aumenta el número de condición al refinar la malla (menores tamaños de EF) sino que también aumenta la velocidad con la que crece (la pendiente representa el orden de crecimiento) a medida que complejizamos la condición de borde. En un problema típico de elementos finitos se tiene que este orden es alrededor de 2, que es lo que ocurre con el caso L. Ahora en el caso P este número tiene un ligero incremento con respecto al L, pero es notable el aumento que se produce en el caso de MR. Esto muestra la dificultad que hay en resolver problemas multiescala con mallas cada vez más finas, más si se considera el uso de métodos iterativos. Finalmente, realizando el mismo análisis pero utilizando ML, se obtuvo que ésta pendiente en el P y MR están alrededor de 2, es decir el utilizar ML asemeja el problema a uno lineal, lo cual podría resultar de gran utilidad a la hora de aplicar métodos iterativos en la resolución de estos sistemas.

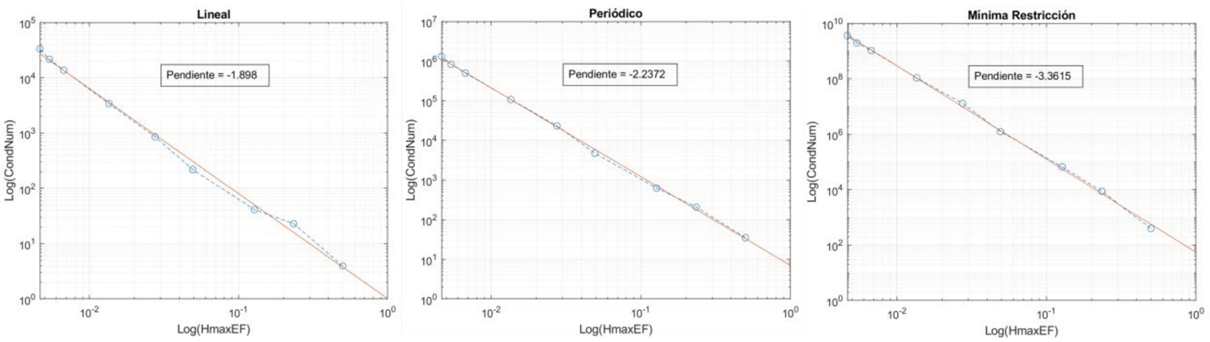

Figura 3: Evolución del NC en función del tamaño de malla para cada condición de borde.

CONCLUSIONES

Utilizar técnicas multiescala conlleva una complejidad adicional, en particular debido a las condiciones de borde no estándar, se genera un cambio en la topología y número de condición de las matrices del SEL que se debe resolver. Además, como se determinó que esta etapa es crítica (en tiempo de cálculo) para el código computacional utilizado, surge la necesidad de realizar un estudio sobre la estrategia numérica de solución del SEL (método directo, iterativo, precondicionador, etc.) más adecuada en robustez y tiempo de cálculo, por lo que los análisis realizados en este trabajo se encuentran destinados a este fin.

Dentro de estos estudios se encontró la distribución de los autovalores de las matrices para cada condición de borde y técnica de aplicación, mostrando las particularidades de cada una

y las posibles mejoras a implementar, como el ancho de banda. También se determinó la evolución del NC en este tipo de problemas, debido a su influencia en la resolución de un SEL con métodos iterativos.

Para verificar la generalidad de las conclusiones obtenidas se comprobaron que los resultados utilizando otra microcelda diferente (dominio cuadrado, 2 poros de diferente tamaño), fueran los mismos.

Actualmente se está trabajando en la etapa de selección del método iterativo y precondicionador más adecuado, teniendo en cuenta las conclusiones encontradas en este trabajo.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Feyel, F. y **Chaboche**, **J.L.** 2000. FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials, CMAME, vol. 183, pp. 309-330.
Golub, G. y **Van Loan, Ch.F.** 2013. Matrix Computations, 4th Ed., The John Hopkins Univ. Press.
Kelley, C.T. 1995. Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations. Frontiers in Applied Mathematics, vol. 16. SIAM: Philadelphia, PA.
Saad, Y. 2003. Iterative Methods for Sparse Linear Systems, Second Edition-SIAM.
Shewchuk, J.R. 1994. An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain,Carnegie Mellon University, School of Computer Science,.
Toro, S. 2014. Modelado de falla de materiales mediante formulaciones multiescala.
Zienkiewicz, O.C. y Morgan, K. 2006. Finite elements and approximation.