

Modificación de funciones objetivo para el suavizado y desenredo de mallas de tetraedros

J.M. Escobar¹ E. Rodríguez¹ R. Montenegro¹ G. Montero¹
J.M. González-Yuste¹

Resumen

Básicamente existen dos formas de optimizar una malla. Una de ellas consiste en cambiar las conexiones nodales, definiendo así una nueva topología de la malla. La otra opción conserva la topología inicial, pero cambia las posiciones de los nodos. Con este último procedimiento la mejora de calidad se consigue normalmente mediante un proceso iterativo en el que cada nodo de la malla se mueve hacia una nueva posición que minimiza cierta función objetivo [3], [4], [5] y [7]. En general, las funciones objetivo están asociadas a una medida de calidad de la *submalla local*, esto es, el conjunto de tetraedros conectados al *nodo libre*. Aunque estas funciones objetivo son apropiadas para mejorar la calidad de una malla válida, esto es, aquella que no tiene elementos invertidos, no lo son cuando la malla está enredada. Esto es debido a que las funciones objetivo usuales no están correctamente definidas en todo el espacio, presentando múltiples discontinuidades (barreras) y mínimos locales que impiden el uso de métodos convenciones de optimización.

En este trabajo proponemos la sustitución de estas funciones objetivo por versiones modificadas definidas y regulares en todo el espacio, de manera que hagan posible desenredar y suavizar la malla simultáneamente.

Introducción

Uno de los aspectos fundamentales para la simulación de problemas mediante el método de elementos finitos es la utilización de mallas de calidad. Algunos generadores automáticos de mallas tridimensionales construyen, en una primera aproximación, mallas *válidas* pero con elementos de poca calidad. Además, en ciertos casos especiales, pueden aparecer elementos invertidos, dando lugar a lo que llamamos mallas *enredadas*; véase por ejemplo [8] y [9]. Por tanto, es necesario desarrollar un procedimiento capaz de suavizar y desenredar mallas preexistentes.

El suavizado es una de las técnicas más comunes para mejorar la calidad de una malla válida, esto es, una malla que no tiene elementos invertidos. En esencia, esta técnica consiste en desplazar cada nodo de la malla hasta una nueva posición que optimiza una función objetivo. Esta función está construida a partir de cierta medida de calidad de la *submalla local* $N(v)$, constituida por los tetraedros conectados al *nodo*

libre v. Éste es un proceso que tan sólo mejora la malla localmente y, por ello, se ha de repetir un número suficiente de veces hasta alcanzar la calidad global requerida.

En general, las funciones objetivo que mejores resultados dan son las que presentan barreras en el límite de la región factible. En este contexto la región factible es el conjunto de puntos donde puede estar localizado v para conseguir que $N(v)$ sea válida. En ocasiones este conjunto puede ser vacío, por ejemplo, cuando la frontera fija de $N(v)$ está enredada.

Las barreras evitan que el nodo libre abandone la región factible si inicialmente v estaba situado en su interior. Sin embargo, por idéntica razón, impedirán que acceda a ella cuando parte de una posición exterior. En esta última situación hay elementos en $N(v)$ con volumen negativo y, por tanto, la submalla local está enredada.

Ante este problema podemos actuar como propone Freitag et al [3], [4], en donde el proceso de optimización se divide en dos etapas. En la primera se desenreda la malla mediante un proceso de optimización que maximiza el volumen de los elementos invertidos y, en la segunda, se suaviza haciendo uso las funciones objetivo antes mencionadas.

En este trabajo proponemos una alternativa a este procedimiento, de manera que el desenredo y el suavizado se lleven a cabo en una misma etapa. Para ello modificamos las funciones objetivo haciendo que se eviten las singularidades introducidas por las barreras pero manteniendo las posiciones en que se encontraban los mínimos en las funciones originales.

Funciones objetivo

Las funciones objetivo se pueden construir partiendo de alguna medida de calidad de los tetraedros [2]. Sin embargo, aquellas que se obtienen mediante operaciones algebraicas son especialmente adecuadas para nuestro propósito ya que el coste computacional requerido para su evaluación puede ser muy bajo.

Sea T un elemento tetraédrico en el espacio físico cuyos vértices están dados por $\mathbf{x}_k = (x_k, y_k, z_k)^T \in \mathbb{R}^3$, $k = 0, 1, 2, 3$ y sea T_R el elemento de referencia con vértices en $\mathbf{u}_0 = (0, 0, 0)^T$, $\mathbf{u}_1 = (1, 0, 0)^T$, $\mathbf{u}_2 = (0, 1, 0)^T$ and $\mathbf{u}_3 = (0, 0, 1)^T$. Si elegimos \mathbf{x}_0 como vector de traslación, la aplicación afín que transforma T_R en T es $\mathbf{x} = A\mathbf{u} + \mathbf{x}_0$, donde A es la matriz jacobiana de la aplicación referida al nodo \mathbf{x}_0 , y expresada como $A = (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_0)$.

Sea ahora T_I un tetraedro equilátero de lado unitario y cuyos vértices están situados en $\mathbf{v}_0 = (0, 0, 0)^T$, $\mathbf{v}_1 = (1, 0, 0)^T$, $\mathbf{v}_2 = (1/2, \sqrt{3}/2, 0)^T$, $\mathbf{v}_3 = (1/2, \sqrt{3}/6, \sqrt{2}/\sqrt{3})^T$. Sea $\mathbf{v} = W\mathbf{u}$ la aplicación lineal que transforma T_R en T_I , siendo $W = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$ su matriz jacobiana.

Por tanto, la aplicación afín que transforma T_I en T está dada por $\mathbf{x} = AW^{-1}\mathbf{v} + \mathbf{x}_0$, y su matriz jacobiana es $S = AW^{-1}$. La matriz S es independiente del nodo elegido como referencia; diremos que es *invariante nodal* [6].

Una posible medida de calidad del tetraedro T esá dada por $q = \frac{3\sigma^{\frac{2}{3}}}{|S|^2}$, donde $\sigma = \det(S)$. Ésta es, según se muestra en [6], una *medida de calidad algebraica* de T . El máximo valor que puede tomar esta medida es la unidad y corresponde al tetrae-

dro equilátero. Además, cualquier tetraedro plano o degenerado tiene medida nula. Podemos obtener una función de optimización a partir de esta medida de calidad. Así, sea $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$ la posición del nodo libre v , y S_m la matriz jacobiana correspondiente al m -ésimo tetraedro de $N(v)$. Definiremos la función objetivo de \mathbf{x} asociada al m -ésimo tetraedro como

$$\eta_m = \frac{|S_m|^2}{3\sigma_m^{\frac{2}{3}}} \quad (1)$$

Así, la función objetivo correspondiente a $N(v)$ se puede construir a partir de la p -norma de $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_M)$ como

$$|K_\eta|_p(\mathbf{x}) = \left[\sum_{m=1}^M \eta_m^p(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{p}} \quad (2)$$

donde M es el número de tetraedros en $N(v)$.

Si denotamos por H_m los semiespacios definidos por $\sigma_m(\mathbf{x}) \geq 0$, entonces, la región factible será el interior del poliedro P definido como $P = \bigcap_{m=1}^M H_m$.

Las funciones objetivo $|K_\eta|_p$ son suaves en la región factible pero tienden a infinito cuando v se aproxima a la frontera de P . En esta frontera aparece una barrera que impide a los algoritmos basados en el gradiente alcanzar el mínimo requerido cuando comienzan desde una posición de v externa a la región factible. Además, en el caso en que no exista dicha región, $|K_\eta|_p$ deja de tener sentido como función de optimización.

Funciones objetivo modificadas

En este trabajo proponemos una modificación de la función objetivo (2), de manera que se elimine la barrera y se consiga que la nueva función sea suave en \mathbb{R}^3 . Un requisito esencial es que los mínimos de la función objetivo original y la modificada sean casi idénticos cuando $\text{int } P \neq \emptyset$. Nuestra modificación consiste en sustituir σ en (2) por la función creciente y positiva

$$h(\sigma) = \frac{1}{2}(\sigma + \sqrt{\sigma^2 + 4\delta^2}) \quad (3)$$

donde $\delta = h(0)$. En la Fig. 1 está representada la función $h(\sigma)$. Así, la nueva función objetivo propuesta aquí está dada por

$$|K_\eta^*|_p(\mathbf{x}) = \left[\sum_{m=1}^M (\eta_m^*)^p(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{p}} \quad (4)$$

donde

$$\eta_m^* = \frac{|S_m|^2}{3h^{\frac{2}{3}}(\sigma_m)} \quad (5)$$

es la función objetivo modificada para el tetraedro m -ésimo.

El comportamiento de $h(\sigma)$ en función del parámetro δ es tal que, $\lim_{\delta \rightarrow 0} h(\sigma) = \sigma$, $\forall \sigma \geq 0$ y $\lim_{\delta \rightarrow 0} h(\sigma) = 0$, $\forall \sigma \leq 0$. Así, si $\text{int } P \neq \emptyset$, entonces $\forall \mathbf{x} \in \text{int } P$ tenemos $\sigma_m(\mathbf{x}) > 0$, para $m = 1, 2, \dots, M$ y, a medida que vayamos eligiendo valores de δ más pequeños, $h(\sigma_m)$ se va pareciendo más a σ_m , de manera que, la función original y su correspondiente versión modificada son muy próximas en la región factible. Así, en dicha región, $|K_\eta^*|_p$ converge puntualmente a $|K_\eta|_p$ cuando $\delta \rightarrow 0$. Además, considerando que $\forall \sigma > 0$, $\lim_{\delta \rightarrow 0} h'(\sigma) = 1$ y $\lim_{\delta \rightarrow 0} h^{(n)}(\sigma) = 0$, para $n \geq 2$, es fácil comprobar que las derivadas de la función objetivo verifican la misma propiedad de convergencia. Como resultado de estas consideraciones, podemos concluir que las posiciones de v que minimizan la función objetivo original y la modificada son casi idénticas cuando el valor de δ es *pequeño*. En realidad, δ se selecciona en función del punto v bajo consideración, haciéndolo tan pequeño como sea posible pero de manera que la evaluación del mínimo de la función objetivo modificada no presente ningún problema computacional.

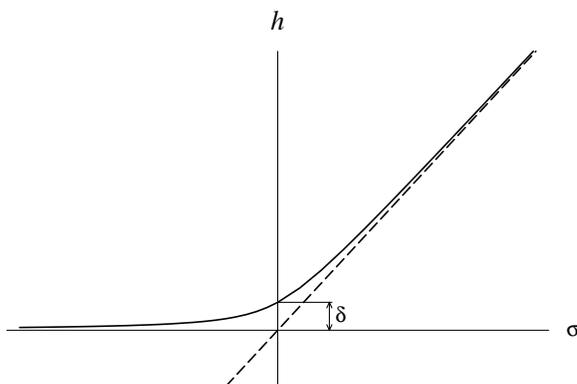


Figura 1: Representación de la función $h(\sigma)$.

Supongamos ahora que, $\text{int } P = \emptyset$, entonces la función objetivo original, $|K_\eta|_p$, no es adecuada para nuestro propósito ya que no está correctamente definida. Sin embargo, la función objetivo modificada está correctamente definida y tiende a resolver el enredo. Podemos razonar esto desde un punto de vista cualitativo considerando que los términos dominantes en $|K_\eta^*|_p$ son aquellos que están asociados a tetraedros con valores de σ más negativos y, por ello, la minimización de estos términos implica el incremento de estos valores. Debemos remarcar que $h(\sigma)$ es una función creciente y $|K_\eta^*|_p$ tiende a ∞ cuando el volumen de cualquier tetraedro de $N(v)$ tiende a $-\infty$, ya que $\lim_{\sigma \rightarrow -\infty} h(\sigma) = 0$.

En resumen, mediante la función objetivo modificada, podemos desenredar la malla a la vez que mejoramos su calidad. Obviamente, la modificación propuesta aquí puede aplicarse fácilmente a otras funciones objetivo del mismo tipo.

Para comprender mejor el comportamiento de la función objetivo y su modificación, proponemos el siguiente problema ejemplo. Consideremos una malla en 2-D formada por tres triángulos, vBC , vCA y vAB , donde hemos fijado $A(0, -1)$, $B(\sqrt{3}, 0)$, $C(0, 1)$, y $v(x, y)$ es el nodo libre. En este caso, la región factible es el interior del triángulo equilátero ABC . En la Fig. 2(a) se muestra $|K_\eta|_2$ (línea continua) y $|K_\eta^*|_2$ (línea discontinua) como una función de x para un valor fijo $y = 0$ (la coordenada y de la

solución óptima). El valor elegido de δ es 0,1. Podemos ver que la función original presenta múltiples mínimos locales y discontinuidades, al contrario de lo que le ocurre a la función modificada. Además, la función objetivo original alcanza su mínimo absoluto fuera de la región factible. Las asíntotas verticales en la función objetivo original corresponden a posiciones del nodo libre para las que $\sigma = 0$ para alguno de los tetraedros de la malla local. Como cabría esperar en este ejemplo, la solución óptima para la función modificada es $v(\sqrt{3}/3, 0)$. La función modificada y la original son casi idénticas en la proximidad de este punto, véase Fig. 2(a).

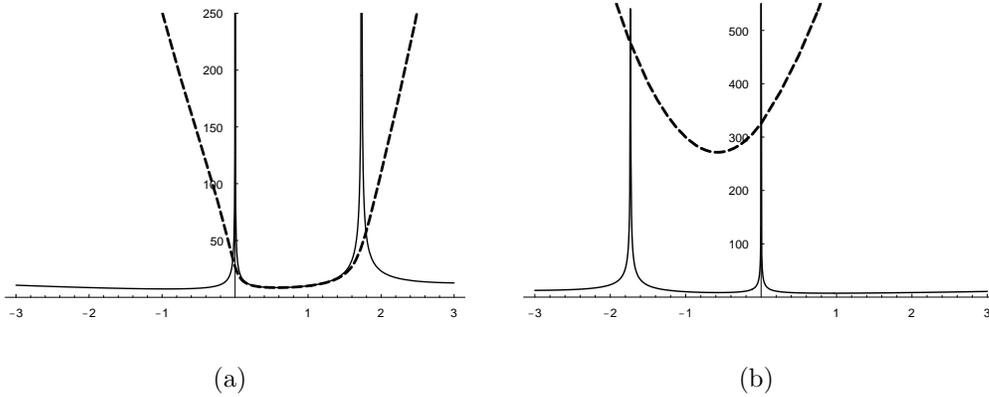


Figura 2: (a) Corte transversal de $|K_\eta|_2$ (línea continua) y $|K_\eta^*|_2$ (línea discontinua) para el ejemplo 2-D; (b) la misma función objetivo para la malla enredada.

Consideremos ahora la malla enredada obtenida al cambiar la posición del punto $B(\sqrt{3}, 0)$ por $B'(-\sqrt{3}, 0)$. Aquí, la malla está constituida por los triángulos $vB'C$, vCA y vAB' , donde $vB'C$ y vAB' están invertidos. En esta nueva situación no existe región factible. Las gráficas de las funciones $|K_\eta|_2$ y $|K_\eta^*|_2$ están representadas en la Fig. 2(b). Si bien la malla no puede ser desenredada, obtenemos $v(-\sqrt{3}/3, 0)$ como posición óptima del nodo libre utilizando la función objetivo modificada. Para esta posición los tres triángulos están “igualmente invertidos” (tienen iguales valores de σ). En este ejemplo se habrían obtenido los mismos resultados si se hubiera maximizado el mínimo valor de σ en la malla, tal como se propone en [3] y [4].

Aplicaciones

Para analizar la eficiencia de estas técnicas vamos a considerar, en primer lugar, una malla regular de un cubo de lado unidad con 750 tetraedros y 216 nodos uniformemente distribuidos con una valencia máxima de 16. Con objeto de conseguir una malla enredada, transformamos este cubo unitario en otro mayor ($10 \times 10 \times 10$) cambiando las coordenadas de algunos nodos pero preservando todas sus conectividades. Los nodos interiores permanecen en las posiciones originales, los nodos situados sobre las aristas del cubo unitario son recolocados sobre las aristas del cubo transformado y, finalmente, los nodos interiores de cada cara del cubo original son proyectados sobre las correspondientes caras del cubo transformado. La malla inicial enredada, mostrada en la Fig.

3(a), tiene 10 tetraedros invertidos y una calidad media $q_{avg} = 0,384$ (la calidad media de la malla regular inicial era 0,749). Además, aproximadamente el 50 % tiene una calidad muy pobre (menor que 0,04). La medida de calidad elegida aquí es la propuesta en [3] y [5], $q = \frac{3}{|S_m||S_m^{-1}|}$, para los tetraedros válidos y $q = 0$ para los invertidos. Los resultados después de veinte pasadas del proceso de optimización con $|K_\eta^*|_2$ se muestran en Fig. 3(b). En la Fig. 4 presentamos el promedio de calidad, q_{avg} , y la calidad mínima, q_{min} , en función del número de iteraciones del proceso de optimización. Nótese que la calidad promedio decrece inicialmente debido a que el número de tetraedros invertidos aumenta en las primeras iteraciones. La malla tiene 22 tetraedros invertidos después de la primera iteración, 33 después de la segunda, 16 después de la tercera, 11 después de la cuarta y 0 después de la quinta.

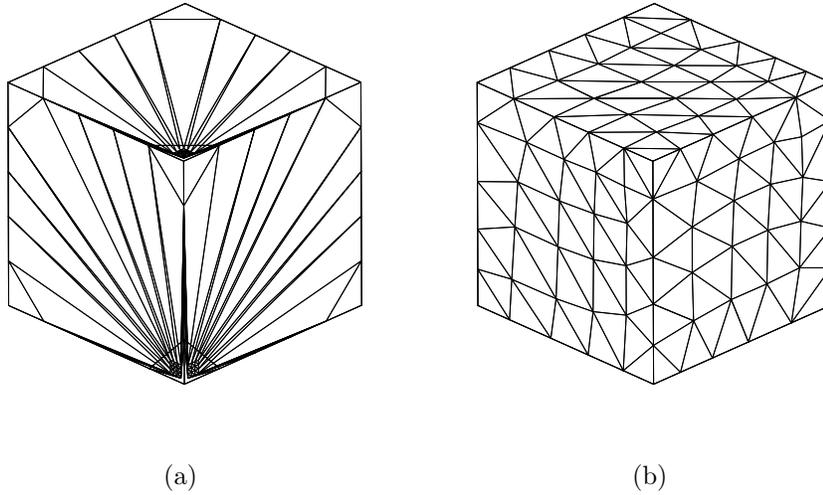


Figura 3: (a) Malla inicial enredada; (b) la malla resultante después de veinte iteraciones del proceso de optimización.

Estas técnicas de optimización han sido utilizadas también para construir mallas en 3-D adaptadas a superficies complicadas, como las definidas por terrenos irregulares [8] y [9]. En la malla resultante puede haber, ocasionalmente, elementos con calidades muy bajas o incluso elementos invertidos, haciendo necesario aplicar algún procedimiento de desenredo y suavizado. Como aplicación del generador de malla y del proceso de optimización consideramos el problema test del “volcán” mostrado en la Fig. 5. En este caso la malla tiene 20038 tetraedros y 4013 nodos, con una valencia máxima de 31. La malla inicial enredada tiene 576 tetraedros invertidos y una calidad media de $q_{avg} = 0,529$. La distribución de nodos inicial es modificada durante el proceso de optimización de manera que todos los elementos invertidos desaparecen en la cuarta iteración y la calidad media se incrementa hasta $q_{avg} = 0,615$ en la sexta iteración. Este proceso se completa en tan sólo unos pocos segundos de tiempo de CPU en un ordenador XEON. El algoritmo de optimización empleado para minimizar las funciones objetivo fue la variante Levenberg Marquardt del método Newton [1].

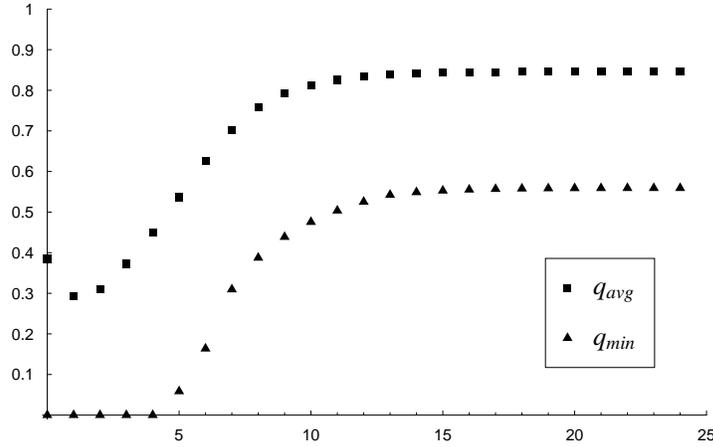


Figura 4: Valores de la calidad promedio q_{avg} y de la calidad mínima q_{min} en función del número de iteraciones del proceso de optimización para el problema del cubo.

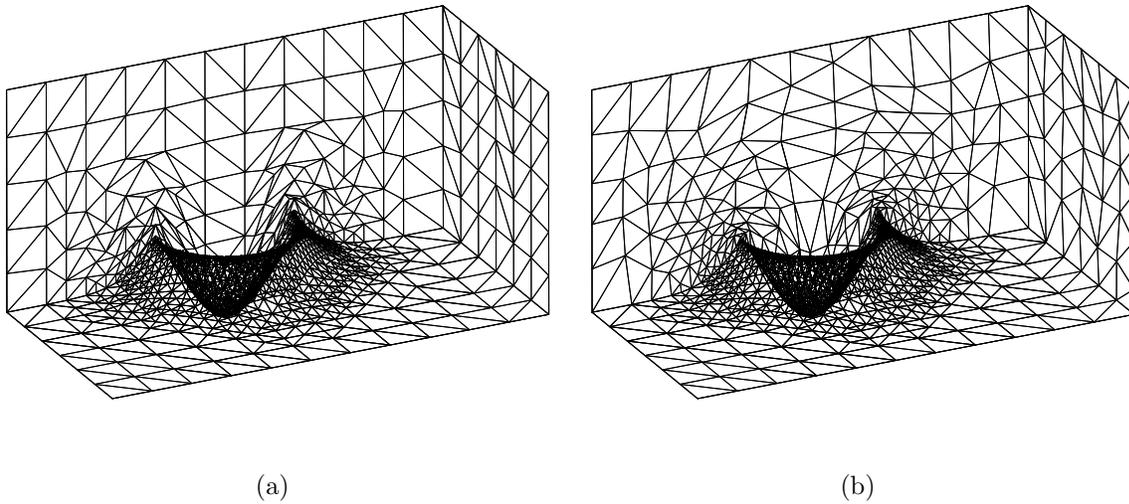


Figura 5: Problema test del “Volcán”: (a) malla inicial con 576 tetraedros invertidos y (b) malla resultante después de seis iteraciones del proceso de optimización.

Conclusiones

En este trabajo presentamos una manera de evitar las singularidades introducidas por funciones de optimización de mallas con barrera. Para ello, proponemos una modificación de estas funciones de manera que pasen a ser regulares en todo \mathbb{R}^3 . Así, las funciones objetivo modificadas pueden ser utilizadas para desenredar y suavizar la malla simultáneamente. La regularidad que exhiben estas funciones modificadas hace posible utilizar algoritmos usuales de optimización como mínimo descenso, gradiente conjugado, Newton, etc. En principio, la modificación propuesta aquí podría ser tam-

bién aplicable a otras funciones objetivo del mismo tipo que la estudiada aquí, es decir, funciones con barrera en el límite de la región factible.

Agradecimientos

Trabajo apoyado por el REN2001-0925-C03-02/CLI del MCYT

Referencias

- [1] M.S. Bazaraa, H.D. Sherali, C.M. Shetty, *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*, John Wiley and Sons, Inc., Reading (New York), (1993)
- [2] J. Dompierre, P. Labbé, F. Guibault, R. Camarero, “Proposal of Benchmarks for 3D Unstructured Tetrahedral Mesh Optimization”, *In Proc. 7th International Meshing Roundtable*, Sandia National Laboratories (1998), 459-478
- [3] L.A. Freitag, P.M. Knupp, “Tetrahedral Element Shape Optimization Via the Jacobian Determinant and Condition Number”, *In Proc. of the 8th International Meshing Roundtable*, Sandia National Laboratories (1999), 247-258
- [4] L.A. Freitag, P. Plassmann, “Local Optimization-based Simplicial Mesh Untangling and Improvement”, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **49**, (2000), 109-125
- [5] L.A. Freitag, P.M. Knupp, “Tetrahedral Mesh Improvement via Optimization of the Element Condition Number”, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **53**, (2002), 1377-1391
- [6] P.M. Knupp, “Algebraic Mesh Quality Metrics”, *SIAM J. Sci. Comput.*, **23**, (2001), 193-218
- [7] P.M. Knupp, “Achieving Finite Element Mesh Quality via Optimization of the Jacobian Matrix Norm and Associated Quantities. Part II - A Frame Work for Volume Mesh Optimization and the Condition Number of the Jacobian Matrix”, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **48**, (2000), 1165-1185
- [8] R. Montenegro, G. Montero, J.M. Escobar, E. Rodríguez, J.M. González-Yuste, “Tetrahedral Mesh Generation for Environmental Problems over Complex Terrains”, In: Sloot, P.M.A., Tan, C.J.K., Dongarra, J.J., Hoekstra, A.G. (eds.): *Computational Science-ICCS'2002. Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 2329. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, (2002), 335-344
- [9] R. Montenegro, G. Montero, J.M. Escobar, E. Rodríguez, “Efficient Strategies for Adaptive 3-D Mesh Generation over Complex Orography”, *Neural, Parallel & Scientific Computation*, **10**(1), (2002), 57-76

1 Instituto Universitario de Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en Ingeniería. Universidad de Las Palmas de Gran Canaria. Campus Universitario de Tafira. 35017-Las Palmas de Gran Canaria.