Esquema local de precondicionamiento para resolver la ecuación de Poisson mediante funciones de base radial

J.A. García-López¹, J. Alavez-Ramírez^{1*}, J. López-Estrada² ¹Universidad Juárez Autónoma de Tabasco ²Universidad Nacional Autónoma de México * justino.alavez@ujat.mx

Resumen

En este trabajo se explora la construcción de un precondicionador basado en la aproximación de una función cardinal mediante una combinación lineal de funciones multicuádricas, con el objetivo de reducir el tiempo de cómputo y aminorar los efectos del mal condicionamiento en la solución numérica del sistema lineal asociado a la aproximación de la solución de la ecuación de Poisson mediante un esquema de colocación asimétrico. Se aproxima la función cardinal usando un esquema local, que permite aproximarla tomando en cuenta solo un pequeño subconjunto de nodos del dominio. Varios investigadores proponen reducir el error que ocurre en los nodos del dominio que se encuentran más distantes, mediante la introducción de un conjunto de nodos especiales. En este artículo también se propone una distribución de puntos en el cuadrado unitario, que permiten seleccionar el conjunto de nodos especiales destinados a complementar el esquema local. Finalmente, se hace una comparación entre el número de flops necesarios para calcular el procondicionador y para calcular la pseudoinversa de Moore Penrose.

Palabras clave: Método libre de mallas; Nodos especiales; Función cardinal.

1 Introducción

Recientemente ha habido un gran interés en métodos sin mallas, como una alternativa al uso de los métodos convencionales como diferencias finitas, elemento finito y volúmenes finitos. Especialmente porque los métodos sin mallas hacen uso de un conjunto de nodos dispersos, pudiendo prescindir de la generación de mallas que consume por lo general alrededor del 70 % del tiempo de cómputo necesaria para la implementación de los métodos convencionales [3]. Los métodos desarrollados a partir del uso de funciones de base radial pueden aplicarse indistintamente a problemas con cualquier número de dimensiones, en donde los métodos convencionales presentan dificultades. Tienen diversas aplicaciones en la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) ([7] y [8]) y de problemas de interpolación [4], con lo que han sido utilizadas en la modelación de fenómenos físicos, químicos, económicos y financieros, entre otros. Usualmente se observa un mal condicionamiento del sistema lineal asociado cuando se intenta mejorar la exactitud, así como buen condicionamiento cuando se disminuye la exactitud, lo cual subraya una incierta relación entre estas dos cantidades [12]. Se han propuesto varias alternativas a la problemática relacionada con el mal condicionamiento del sistema asociado ([1], [2], [5], [6], [9], [10] y [11]). Aquí se presenta una alternativa para aminorar el tiempo de cómputo y los efectos de mal condicionamiento del sistema lineal asociado mediante la construcción de un precondicionador a través de una función cardinal formada por una combinación de funciones de base radial (FBR).

Una $\Phi : \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$ se llama FBR, si existe una función de una variable $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ tal que $\Phi(\boldsymbol{x}) = \phi(r)$, donde $r = \|\boldsymbol{x}\|_2, \, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^s$.

2 Descripción del problema

El problema consiste en resolver la ecuación de Poisson con condiciones de frontera de Dirichlet, es decir

$$\begin{aligned} \nabla^2 p &= f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \\ p(\boldsymbol{x}) &= g(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \partial \Omega. \end{aligned}$$
 (1)

El método propuesto para resolver (1) consiste en encontrar una solución aproximada para la función incógnita p, que se seguirá llamando p, como una combinación lineal de funciones multicuádricas ϕ , es decir

$$p(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \phi(\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j\|_2),$$

donde $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$, N es el número total de nodos \boldsymbol{x}_j en el dominio Ω y $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$.

Se supone que la colocación de los nodos han sido arreglados de tal manera que los primeros N_I están en Ω y los últimos N_B están en $\partial\Omega$. De (1) se sigue que para $i = 1, 2, ..., N_I$:

$$f_i = f(\boldsymbol{x}_i) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \nabla^2 \phi(\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2), \quad (2)$$

y para $i = N_I + 1, N_I + 2, ..., N$:

$$g_i = g(\boldsymbol{x}_i) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2). \quad (3)$$

Nótese que (2) y (3) determinan un sistema de N ecuaciones lineales con N incógnitas λ_j , dado por

$$A\lambda = \boldsymbol{f},\tag{4}$$

donde $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, ..., f_{N_I}, g_{N_I+1}, g_{N_I+2}, ..., g_N)^T$ $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N)^T, A_{ij} = \nabla^2 \phi(\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2)$ para ra $i = 1, 2, ..., N_I$ y $A_{ij} = \phi(\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2)$ para $i = N_I + 1, N_I + 2, ..., N$ y j = 1, 2, ..., N en ambos casos.

La matriz de coeficientes del sistema (4) es generalmente no simétrica y llena, y es mal condicionada, aún para N moderado. El mal condicionamiento empeora cuando N crece o cuando se usa una FBR plana (por ejemplo, las multicuadrícas con parámetros de forma c grandes) [3]. El mal condicionamiento tiene un comportamiento exponencial cuando N crece, el cual puede apreciarse en la figura 1, en donde se muestra el condicionamiento de la matriz A cuando se usa el método anterior a una distribución de nodos con $N = (10^k + 1)^2$, lo cual subraya la necesidad de usar un método de precondicionamiento.



Figura 1: Condicionamiento de la matriz A, según el tamaño de paso $\Delta x = \Delta y = 10^{-k}$.

Aunque existen algunas combinaciones muy raras de las disposiciones de los centros de datos y c que pueden producir una matriz singular, la singularidad se puede remover al perturbar el valor de c o los centros de datos (agregando o eliminado centros). En el caso en que ocurra una matriz singular, el precondicionamiento es un esfuerzo inútil [3].

3 Método de precondicionamiento mediante aproximación de funciones cardinales

Sea $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ un conjunto de centros. Una función cardinal para problemas de interpolación asociada con el centro $x_i \in X$ tiene la forma

$$\psi_i(\cdot) = \sum_{j=1}^N \tilde{w}_{ji} \phi(\|\cdot - \boldsymbol{x}_j\|_2), \qquad (5)$$

donde $\psi_i(\boldsymbol{x}_i) = 1$ y $\psi_i(\boldsymbol{x}_j) = 0, j = 1, 2, ..., N,$ $j \neq i$. En este caso, la matriz \tilde{W} con entradas \tilde{w}_{ji} sería la inversa de la matriz de interpolación FBR sobre el conjunto de datos X [3]. Un precondicionador W se calcula de tal forma que el sistema

$$WA\lambda = Wf,$$

sea más fácil de resolver por el método del residuo mínimo generalizado (GMRES, por sus siglas en inglés) que el sistema (4). En todos los casos discutidos, los precondicionadores resultantes son sparse.

Sean $\sigma \ll N$ y $S_i = [s_i(1), \ldots, s_i(\sigma)]$ un subconjunto de los índices $[1, 2, \ldots, N]$ asociados con el centro \boldsymbol{x}_i . Suponga que la expresión (5) está formado por un conjunto relativamente pequeño de FBR en lugar de todo el conjunto Xdando una función de base cardinal aproximada (FBCA). Entonces [3],

$$\psi_i(\cdot) = \sum_{j \in \mathcal{S}_i} w_{ji} \phi(\|\cdot - \boldsymbol{x}_j\|_2)$$
$$= \sum_{k=1}^{\sigma} w_{i,s_i(k)} \phi(\|\cdot - \boldsymbol{x}_{s_i(k)}\|_2),$$

y que satisface la condición cardinal: $\psi_i(\boldsymbol{x}_i) = 1$ y $\psi_i(\boldsymbol{x}_j) = 0$ para $i \neq j \in S_i$. Los otros elementos w_{ij} son ceros para $j \notin S_i$. En términos generales, el conjunto de índice S_i se debe elegir de los centros locales y de algunos puntos especiales tanto para el problema de interpolación como para el problema FBR para EDP. La elección de S_i como conjunto de índices correspondientes a puntos locales únicamente, produce resultados pobres lejos de x_i . Sin embargo, al añadir un conjunto ampliamente dispersa de puntos especiales dentro del dominio contrarresta el crecimiento de la FBCA. Puesto que en cada fila W_i del precondicionador W tiene únicamente σ entradas diferentes de cero, éstos se calculan resolviendo el sistema

$$B_i^T W_i = e_i$$

donde e_i representa el *i*-ésimo vector de la base estándar de longitud σ , i = 1, 2, ..., N, y

$$B_{i} = \begin{bmatrix} A_{s_{i}(1),s_{i}(1)} & A_{s_{i}(1),s_{i}(2)} & \cdots & A_{s_{i}(1),s_{i}(\sigma)} \\ A_{s_{i}(2),s_{i}(1)} & A_{s_{i}(2),s_{i}(2)} & \cdots & A_{s_{i}(2),s_{i}(\sigma)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{s_{i}(\sigma),s_{i}(1)} & A_{s_{i}(\sigma),s_{i}(2)} & \cdots & A_{s_{i}(\sigma),s_{i}(\sigma)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{\sigma \times \sigma}.$$

Entonce las entradas de la i-ésima fila de W están dadas por

$$W_{ij} = \begin{cases} w_{ik}, & \text{si } j = s_i(k) \text{ para } k = 1, \dots, \sigma \\ 0, & \text{para otro caso.} \end{cases}$$

Así que el cálculo necesario para encontrar el precondicionador W mediante la aproximación de una función cardinal basada en la solución local del problema de interpolación consiste en resolver N sistemas lineales de tamaño $\sigma \times \sigma$.

4 Experimentación computacional

En esta sección se aplica el método de precondicionamiento con y sin nodos especiales descrito en la sección 3 para resolver la ecuación de Poisson con condición de frontera de Dirichlet en el cuadrado unitario $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$ [3]:

$$\nabla^2 p = f(x, y), \quad (x, y) \in \operatorname{int}(\Omega)
p(x, y) = g(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega$$
(6)

donde

$$f(x,y) = \frac{7\pi^2}{12} \left(\cos\left(\frac{\pi x}{6}\right) \cos\left(\frac{7\pi x}{4}\right) \sin\left(\frac{3\pi y}{4}\right) \sin\left(\frac{5\pi y}{4}\right) \right) \\ + \frac{15\pi^2}{8} \left(\cos\left(\frac{3\pi y}{4}\right) \cos\left(\frac{5\pi y}{4}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{6}\right) \sin\left(\frac{7\pi x}{4}\right) \right) \\ - \frac{751\pi^2}{144} \left(\sin\left(\frac{\pi x}{6}\right) \sin\left(\frac{7\pi x}{4}\right) \sin\left(\frac{3\pi y}{4}\right) \sin\left(\frac{5\pi y}{4}\right) \right),$$

$$g(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{si } x = 0 \text{ o } y = 0, \\ A \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{6}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{7\pi x}{4}\right) & \text{si } 0 \le x \le 1, \\ B \operatorname{sen}\left(\frac{3\pi y}{4}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{5\pi y}{4}\right) & \text{si } 0 \le y \le 1, \end{cases}$$
$$A = \operatorname{sen}\left(\frac{3\pi}{4}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{5\pi}{4}\right) \text{ y } B = \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{6}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{7\pi}{4}\right).$$

La solución exacta de (6) está dada por

$$p(x,y) = \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{6}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{7\pi x}{4}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{3\pi y}{4}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{5\pi y}{4}\right), \quad (7)$$

cuya gráfica se muestra en la figura 2.



Figura 2: Gráfica de p(x, y) descrita en (7).

La solución numérica de (6) se realizó usando funciones multicuádricas con un parámetro de forma constante $c = 1/\sqrt{N}$ con una malla uniforme de $N = n \times n$ nodos, n = 28, y un número variable de nodos en la localidad. En la figura 3 se muestra la distribución de puntos que se usaron y que fueron generados con $\Delta x = \Delta y = 0.04$. Los nodos llenos representan los nodos en dos capas de la frontera con el fin de disminuir el error de interpolación (Shu et al. 2003 [13]) y los nodos restantes corresponden a los del interior del dominio Ω .

El conjunto de nodos especiales consta de 9 nodos pertenecientes a la distribución de nodos X que se encuentran respectivamente más cercanos a los 9 puntos representados en la figura 4, éste conjunto de puntos se encuentra en Ω y están dados por:

$$\operatorname{conj} = \left\{ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right), \\ \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right), \left(\frac{1}{2}, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 1\right), \left(1, \frac{1}{2}\right) \right\}.$$



Figura 3: Distribución de nodos que se usaron para la solución numérica de (6).



Figura 4: Puntos de Ω que determinan los puntos especiales que se usaron para la solución numérica de (6).

La ventaja de tomar el conjunto de puntos especiales dentro de la distribución de nodos Xconsiste en que no hay que realizar ningún procedimiento extra para asegurarse que la distribución de nodos no presenta singularidades al tener nodos repetidos o muy cercanos entre sí. En caso de usar todos los nodos del dominio, la matriz W será la inversa de la matriz A, y en caso de usar un número N de nodos en el dominio local de soporte se obtienen resultados como los que se muestran en la tabla 1.

Resultados usando nodos especiales				
σ	Error máximo	Norma infinito	Error máximo	Norma infinito
	en $p(x, y)$	del error en $p(x, y)$	en WA = I	del error en $WA = I$
13	1.4162	23.1928	1.00220	32.7982
25	0.61372	11.7524	1.00610	20.4337
49	0.66460	12.1553	0.99967	28.2476
98	0.76427	16.5492	0.99629	37.7214
196	0.55833	10.2999	0.99853	39.3210
392	0.98594	17.0185	0.99562	27.3561
Resultados sin el uso de nodos especiales				
$\sigma + 9$	Error máximo	Norma infinito	Error máximo	Norma infinito
	en $p(x, y)$	del error en $p(x, y)$	en WA = I	del error en $WA = I$
13 + 9	5.476	124.0284	12.1347	4899.6121
25 + 9	16.7743	331.9071	8.5985	3509.9313
49 + 9	8.3875	145.6135	6.2661	2441.6879
98 + 9	1.4845	18.3084	4.2735	1608.8968
196 + 9	2.1065	38.1933	3.0168	1016.2169
392 + 9	0.12616	1.2008	0.98685	254.334

Tabla 1: Comparativo entre el uso de nodos especiales y sin usar nodos especiales.

Con el objetivo de realizar una comparación justa entre los dos métodos (precondicionamiento con y sin el uso de nodos especiales) se aumentó la cantidad de nodos en el esquema local, para compensar la introducción de los nodos especiales, de tal forma que en ambos casos se use la misma cantidad de nodos (tabla 1). La comparación entre los dos métodos se realizó midiendo el error máximo y la norma infinita del error en la aproximación de la función p y en la aproximación de la inversa de A. En este caso se usó también $\Delta x = \Delta y = 0.04$, obteniendo un total de 784 nodos, de los cuales 208 corresponden a la frontera de Ω y 576 al interior de Ω .

La exactitud de la aproximación de la inversa de A se midió con la norma infinita de la diferencia entre el producto WA y la identidad, ésta última se representa gráficamente en la figura 5. Las FBR tienen la característica de mostrar mayor error en las fronteras del dominio, esto puede apreciarse claramente en las figuras 7 y 8, en donde se representa en cada caso el producto WA. Debido al reordenamiento efectuado para llegar a la expresión (2) y (3), los nodos de la frontera se encuentran en los primeras 192 posiciones, por lo que es ahí donde se encuentra un mayor error. En las figuras 9 y 10, se muestra el error de aproximación a p(x, y) por cada uno de

los métodos de precondicionamiento local con y sin nodos especiales.



5: Representación del producto Figura $A^{-1}A = I$, mediante la gráfica de f(x, y) = 1si x = y y f(x, y) = 0 si $x \neq y$ para todo nodo $(x, y) \in \Omega$.

Otra comparación que se realiza es entre el método de precondicionamiento local con nodos especiales descrito en este trabajo para estimar A^{-1} con el método del cálculo de la pseudoinversa de Moore Penrose. Se encuentra que el método de precondicionamiento es una alternativa computacionalmente menos costosa, esto se observa en la figura 11, en donde se muestra el



Figura 6: Aproximación de A^{-1} por W mediante el esquema local (sin nodos especiales). En cada caso, se representa el producto WA mediante la gráfica de $f(x_i, y_j) = W_i \cdot A_j$ para el nodo $(x_i, y_j) \in \Omega$, donde W_i es la i-ésima fila de W y A_j es la j-ésima columna de A. Se observa en cada caso que la aproximación de A^{-1} por W no es buena, las representaciones de WA no se parecen a la representación de la matriz identidad I dada en la figura 5.

número de megaflops necesarios para la aplicación de cada método cuando se aproxima A^{-1} para varias distribuciones nodales en las que tiene un tamaño de paso dado por $\Delta x = \Delta y =$ 10^{-k} y un total de nodos $N = (10^k + 1)^2$ y $\sigma = \lceil N/16 \rceil^1$.



Figura 7: Aproximación de A^{-1} por W mediante el esquema local (sin nodos especiales). En cada caso, se representa el producto WA mediante la gráfica de $f(x_i, y_j) = W_i \cdot A_j$ para el nodo $(x_i, y_j) \in \Omega$, donde W_i es la i-ésima fila de W y A_j es la j-ésima columna de A. Se observa en cada caso que la aproximación de A^{-1} por W no es buena, las representaciones de WA no se parecen a la representación de la matriz identidad I dada en la figura 5.

5 Conclusiones

En este artículo se presentó un esquema de colocación asimétrico aplicado para resolver numéricamente la ecuación de Poisson, asumiendo que la solución puede describirse mediante una combinación lineal de funciones de base radial, en donde se tomó la construcción de un precondicionador como estrategia para aminorar los problemas relacionados con el mal condicionamiento del sistema asociado.

 $^{^1{\}rm En}$ esta comparación no se tomó en cuenta las operaciones necesarias para construir la matriz de distancias entre los centros, ni tampoco para determinar los nodos en cada localidad.



Figura 8: Aproximación de A^{-1} por W mediante el esquema local complementado con la introducción de nodos especiales. También en cada caso, se representa el producto WAmediante la gráfica de $f(x_i, y_j) = W_i \cdot A_j$ para el nodo $(x_i, y_j) \in \Omega$, donde W_i es la i-ésima fila de W y A_j es la j-ésima columna de A. A diferencia de las aproximaciones mostradas en la figura 7, en este caso las aproximaciones de A^{-1} por W son muy buenas, pues se nota que las representaciones de WA se parecen mucho más a la representación de la matriz identidad I dada en la figura 5.

Se construyó un precondicionador basado en un esquema local de aproximación de una función cardinal, el cual mostró resultados muy pobres cuando se usaron pocos nodos en el dominio de soporte de cada nodo, lo cual pudo mejorarse mediante la introducción de un conjunto de nodos especiales distribuidos en el dominio. Esta estrategia mostró excelentes resultados, lo cual coincide con experimentos reportados por otros



Figura 9: Error de aproximación a p(x, y) usando precondicionamiento sin la introducción de nodos especiales.

investigadores.

Además de permitir hacerse cargo del mal condicionamiento del sistema asociado, este método reduce considerablemente el esfuerzo computacional necesario para resolver el sistema asociado a la solución numérica de una EDP, lo que convierte a este método en una excelente alternativa a los métodos convencionales.

Referencias

- B.J.C. Baxter. Preconditioned Conjugate Gradients, Radial Basis Functions, and Toeplitz Matrices. Computers & Mathematics with Applications, 43(3/5):305–318, 2002.
- [2] R.K. Beatson, J.B. Cherrie, and C.T. Mouat. Fast Fitting of Radial Basis Fun-



Figura 10: Error de aproximación a p(x, y) usando precondicionamiento con la introducción de nodos especiales.

ctions: Methods Based on Preconditioned GMRES Iteration. Advances in Computational Mathematics, 11(2):253–270, 1999.

- [3] D. Brown, L. Ling, E. Kansa, and J. Levesley. On Approximate Cardinal Preconditioning Methods for Solving PDEs With Radial Basis Functions. *Engineering Analy*sis with Boundary Elements, 29(4):343–353, 2005.
- [4] M.D. Buhmann. Multivariate Cardinal Interpolation With Radial-Basis Functions. *Constructive Approximation*, 6(3):225–255, 1990.
- [5] B. Fornberg and G. Wright. Stable Computation of Multiquadric Interpolants for All Values of the Shape Parameter. *Computers*



Figura 11: Megaflops realizados en la aproximación de A^{-1} usando pseudoinversa de Moore Penrose y el precondicionamiento usando nodos especiales y $\sigma = \lceil N/16 \rceil$ nodos en el esquema local.

& Mathematics with Applications, 48(5/6): 853–867, 2004.

- [6] Y.C. Hon. A Quasi-Radial Basis Functions Method for American Options Pricing. Computers & Mathematics with Applications, 43(3/5):513-524, 2002.
- [7] Y.C. Hon and X.Z. Mao. A Multiquadric Interpolation Method for Solving Initial Value Problems. *Scientific Computing*, 12(1): 51–55, 1997.
- [8] E.J. Kansa. Multiquadrics-A Scattered Data Approximation Scheme With Applications to Computational Fluid-Dynamics-I: Surface Approximations and Partial Derivative Estimates. Computers & Mathematics with Applications, 19(8/9):127-145, 1990.
- [9] E.J. Kansa and Y.C. Hon. Circumventing the Ill-Conditioning Problem With Multiquadric Radial Basis Functions: Applications to Elliptic Partial Differential Equations. Computers & Mathematics with Applications, 39(7/8):123–137, 2000.

- [10] J. Li and Y.C. Hon. Domain Decomposition for Radial Basis Meshless Methods. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 20(3):450–462, 2004.
- [11] L. Ling and E.J. Kansa. A Least-Squares Preconditioner for Radial Basis Functions Collocation Methods. Advances in Computational Mathematics, 23(1):31–54, 2005.
- [12] R. Schaback. Error Estimates and Condition Numbers for Radial Basis Function Interpolation. Advances in Computational Mathematics, 3(3):251–264, 1995.
- [13] C. Shu, H. Ding, and K.S. Yeo. Local Radial Basis Function-Based Differential Quadrature Method and its Application to Solve Two-Dimensional Incompressible Navier-Stokes Equations. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 192:941–954, 2003.