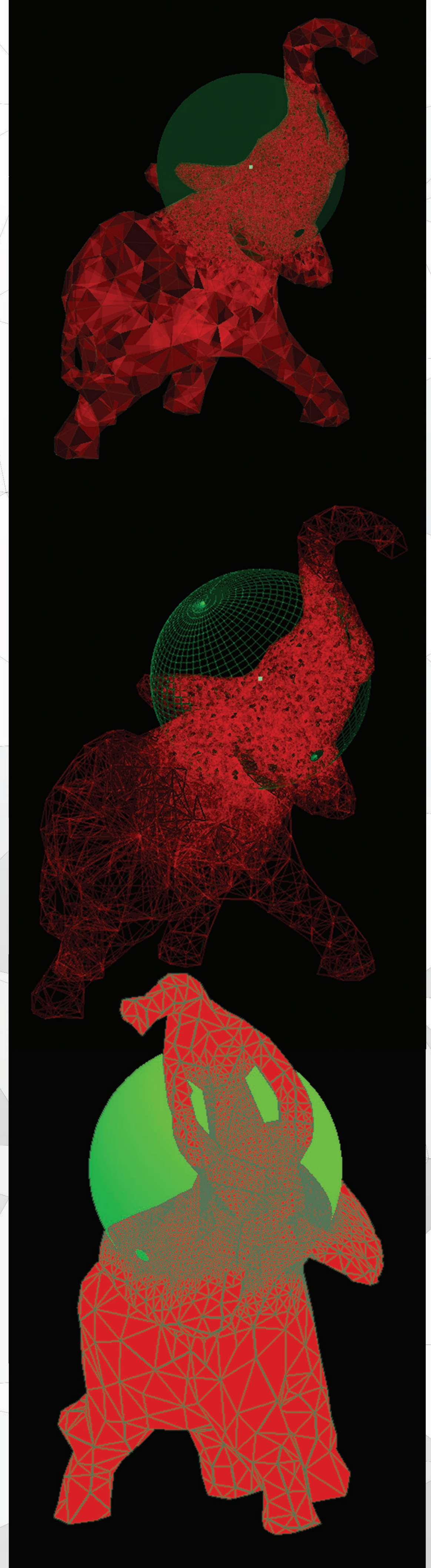
Discretización en ingeniería computacional y visualización científica



María Cecilia Rivara

Profesora Titular Departamento de Ciencias de la Computación, Universidad de Chile. Dr. in Applied Sciences (1984) y Master of Engineering (1980), Katholieke Universiteit Leuven, Leuven, Bélgica; Ingeniera Matemática, Universidad de Chile (1973). Intereses en investigación: Mallas Geométricas y aplicaciones, Algoritmos para Triangulaciones, Algoritmos Paralelos, Métodos Numéricos, Computación Gráfica, Métodos de Elementos Finitos, Modelación Geométrica, Visualización Científica, Ingeniería y Ciencia Computacional, aplicaciones a Ingeniería, aplicaciones Médicas.

mcrivara@dcc.uchile.cl

Discretización es un anglicismo que aún no es aceptado por la Real Academia Española. Es un concepto importante que cruza todos los campos relacionados con Ingeniería y Ciencia Computacional, y que da soporte a la computación gráfica, la visualización científica, la visualización realista, el diseño de las arquitecturas de hardware gráficas, y todas las aplicaciones de estos temas. Se refiere a la necesidad de modelar objetos geométricos continuos en base a una cantidad finita y adecuada de información para los fines requeridos por una aplicación específica. En este artículo revisamos el uso interdisciplinario de estas ideas y lo relacionamos con investigación realizada en el Departamento de Ciencias de la Computación de la Universidad de Chile.

DISCRETIZACIÓN DE SUPERFICIES

Para introducir el tema consideremos una geometría simple: una placa plana rectangular y sin grosor en dos dimensiones. La modelación computacional más simple de esta geometría consiste en seleccionar un conjunto finito y ordenado de puntos (arreglo o matriz) sobre la superficie de la placa que se usa como base para construir una aproximación del objeto geométrico. Con estos datos se puede usar este mismo modelo discreto simple para aproximar la geometría continua (ver Figura 1a), lo que permite definir funciones discretas sobre estos puntos como los usados en los métodos de diferencias finitas. Una alternativa más compleja es construir una aproximación poligonal de la geometría de la placa en base a cuadriláteros o triángulos (Figuras 1b y 1c). En estos dos últimos casos se tiene una aproximación continua de la superficie construida en base a los puntos discretos de la Figura 1a que se transforman en vértices de la malla de cuadriláteros (Figura 1b) y de la triangulación (Figura 1c). Las aproximaciones poligonales tienen la ventaja de ser superficies continuas, donde cada polígono está definido por la ecuación de un plano; tiene área definida y normal asociada. Sobre estas mallas de polígonos se pueden definir funciones con distintos grados de continuidad, de acuerdo a los requerimientos de aplicaciones complejas. También permite realizar trabajo sofisticado de visualización, que requiere de modelos de iluminación que necesitan las normales a la geometría para pintar el objeto.

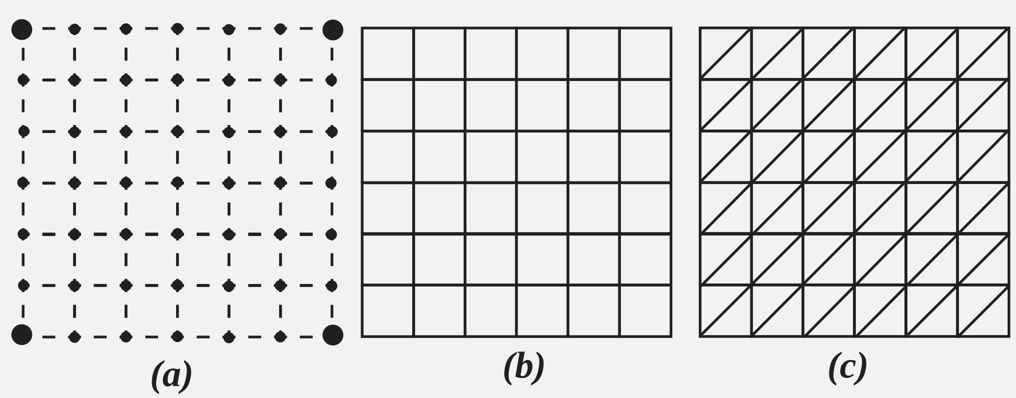


Figura 1 • (a) Modelo discreto: conjunto de puntos. (b) Malla de cuadriláteros. (c) Triangulación (malla de triángulos).

EJEMPLOS DE DISCRETIZACIONES POLIGONALES

Modelos poligonales más avanzados se ilustran en las Figuras 2 y 3. La Figura 2 muestra dos triangulaciones de la superficie del Lago Superior, compartido entre Canadá y Estados Unidos. La triangulación 2a se ha construido en base a una aproximación poligonal del borde de dicho lago. Observe que los vértices de la triangulación corresponden sólo a los vértices del polígono y por esta razón hay muchos triángulos tipo agujas que son inaceptables para muchas aplicaciones. Para la Figura 2b se ha seleccionado automáticamente un conjunto irregular de puntos interiores para modelar la superficie del Lago Superior con triángulos de buena calidad (ángulo pequeño mayor a 30°) mediante el algoritmo Lepp-Delaunay centroide desarrollado e implementado por nuestro grupo de investigación. La Figura 3 ilustra la modelación de un terreno con triangulaciones. La triangulación se ha obtenido usando un algoritmo de simplificación a partir de un reticulado de datos obtenidos por satélite. Se ha utilizado sólo el 5% de los datos para construir una triangulación de buena calidad geométrica bien adaptada a la topografía.

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA ECUACIONES DIFERENCIALES

La gran mayoría de los métodos numéricos para analizar o simular computacionalmente fenómenos físicos, requieren de la discretización de una geometría asociada, como las requeridas para fenómenos físicos modelados por ecuaciones diferenciales ordinarias y por ecuaciones diferenciales parciales.

En el caso de problemas modelados por Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) en dos dimensiones, es necesario discretizar el dominio o geometría bidimensional asociada. Los métodos numéricos más usados para problemas modelados por EDPs, son el método de diferencias finitas y el método de elementos finitos que ejemplificaremos con problemas de estado estacionario (ecuación de Laplace, ecuación de Poisson, ecuaciones elípticas en general). El método de diferencias finitas es intuitivo y simple de explicar y entender. Para el caso particular de un dominio rectangular se utiliza una discretización como la ilustrada en la Figura 1a (conjunto ordenado de puntos discretos), y se aproxima la ecuación diferencial por una ecuación de diferencias sobre cada punto de este reticulado, lo que conduce a resolver numéricamente un sistema de ecuaciones. La solución numérica de la EDP es una función discreta definida sobre el dominio discreto.

El método de elementos finitos en cambio “resuelve” numéricamente un problema matemáticamente más complejo, equivalente al problema de EDP. Éste requiere que el dominio sea aproximado por una malla de polígonos, sobre el cual se construye una solución numérica con mayor grado de continuidad. Tiene la ventaja de manejar adecuadamente geometrías más complejas mediante mallas

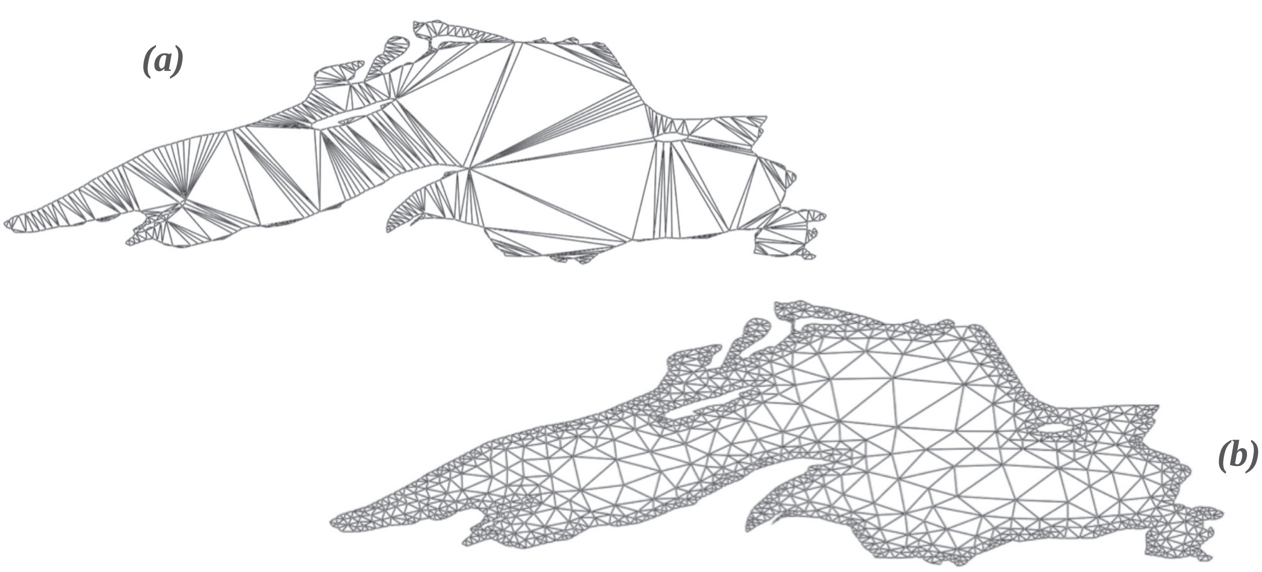


Figura 2 • Lago Superior: (a) Triangulación del borde del polígono. (b) Triangulación de buena calidad (ángulos mayores o iguales a 30°), obtenida con algoritmo Lepp-Delaunay centroide (Rodríguez, Rivara).

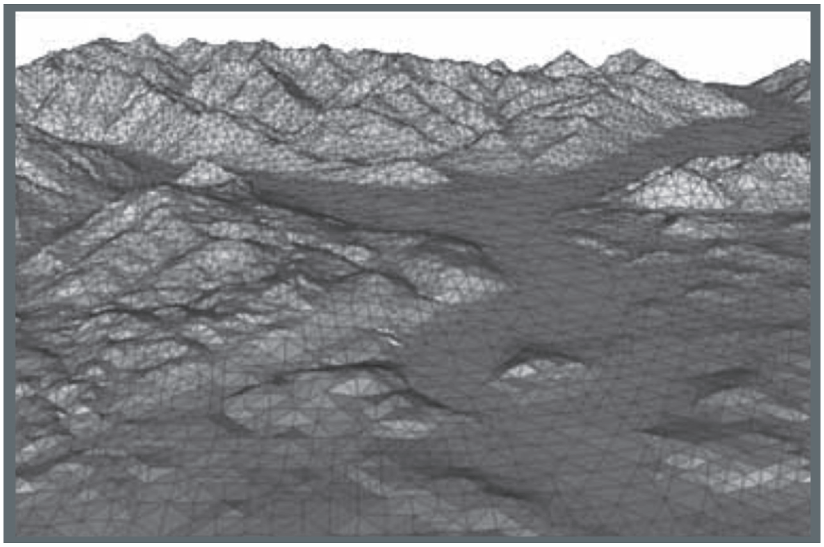


Figura 3 • Triangulación obtenida mediante un algoritmo de simplificación a partir de datos de satélite (usa el 5% de los datos). Trabajo conjunto de la profesora Rivara con investigadores de la Universidad de Gerona (Marité Guerrieri, Narcín Coll, Antoni Sellarès).

irregulares. En la Figura 5 se muestra la triangulación y la solución lineal de elementos finitos del problema descrito por la ecuación de Poisson y las condiciones de borde de la Figura 4 sobre un cuadrado unitario. Para obtener esta solución numérica con buena precisión, se ha usado un método de elementos finitos adaptativo que a partir de una triangulación simple del dominio (cuadrado dividido en dos triángulos rectángulos) construye automáticamente una discretización adaptada a la solución del problema. Estos resultados se han obtenido con el software desarrollado por Eduardo Mercader, en su memoria de Ingeniería Civil en Computación. La Figura 6a muestra una triangulación en tres dimensiones (malla de tetraedros) que aproxima la geometría del corazón, gentileza de Chandrajit Bajaj de la Universidad de Texas en Austin, Estados Unidos.

$$-\Delta u = f, en \quad \Omega = [0,1]x[0,1],$$
$$u=0 \qquad en \quad \partial\Omega$$

donde la solución exacta es la función

$$u = x(x-1)y(y-1)e^{-100((x-0,5)^2+(y-0,117)^2)}$$

Figura 4

PANTALLAS O TERMINALES GRÁFICOS EN 2D

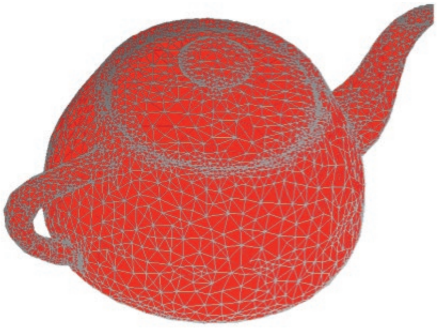
Son dispositivos tecnológicos diseñados y construidos también en base al concepto de discretización para visualizar imágenes computacionales. Las pantallas son en esencia un mundo discreto constituido por un arreglo bidimensional de píxeles. Cada píxel es el elemento mínimo del dibujo (con área mayor que 0) que se accede y pinta independientemente mediante la activación del fósforo ubicado en el píxel. La imagen se construye en base a estas contribuciones. Por supuesto, la calidad de la imagen (ilusión de continuidad) depende de la resolución del dispositivo que corresponde al tamaño de la matriz de píxeles.

COMPUTACIÓN GRÁFICA EN 3D

Es un área de la Ciencia de la Computación cuyo objetivo es visualizar en un dispositivo o pantalla computacional en dos dimensiones, escenas de un "mundo" tridimensional modelado computacionalmente. Es una mezcla de tecnología y modelación matemático/computacional, a lo que se agrega el uso de una secuencia de algoritmos y técnicas (agrupados bajo el nombre técnico de *rendering*), que permiten generar imágenes de buena calidad para el sistema visual humano. Este trabajo se basa en modelar la superficie de los objetos mediante mallas de polígonos, donde es fundamental el uso de las normales para aplicar modelos de iluminación adecuados.

VISUALIZACIÓN REALISTA

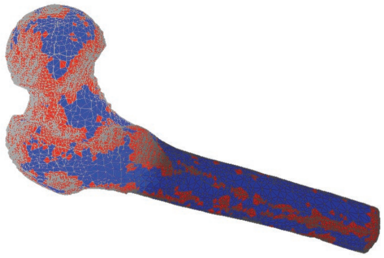
Esta expresión se usa principalmente en las aplicaciones del área de entretención, juegos, y animación 3D (obtención de imágenes fotorrealistas). En general utiliza técnicas avanzadas de computación gráfica. Se inicia con la modelación matemática y computacional de una escena compleja en 3D, continúa con el proceso de rendering que corresponde a la secuencia de pasos necesaria para obtener una visualización aceptable que incluye transformaciones geométricas, proyec-



ción, uso de modelos sofisticados de iluminación y un conjunto de algoritmos y técnicas computacionales. Este proceso culmina con una imagen en el dispositivo que impresiona por su realismo al observador humano, como la que se muestra en la Figura 7, obtenida mediante *ray tracing.*

VISUALIZACIÓN CIENTÍFICA

El objetivo es usar técnicas gráficas para ayudar al analista a comprender o analizar la validez de los resultados de una aplicación de Ingeniería o Ciencia Computacional. Se usan técnicas de visualización simples y esquemáticas que resalten las características inherentes al estudio científico. En esta página se visualizan mallas de tetraedros (sólo la superficie exterior) de un fémur humano y de la tetera de té de Utah obtenidas por nuestro grupo de investigación. En el fémur se han pintado con distinto color los tetraedros según su calidad geométrica. Ejemplos de otros tipos de visualización científica se muestran en la Figura 6.



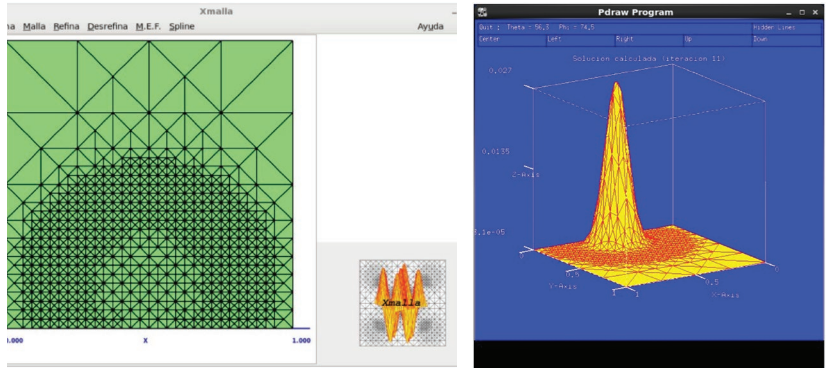


Figura 5 • Discretización y visualización de la solución de elementos finitos del problema de la Figura 4, obtenida con el software desarrollado en el DCC por Eduardo Mercader.

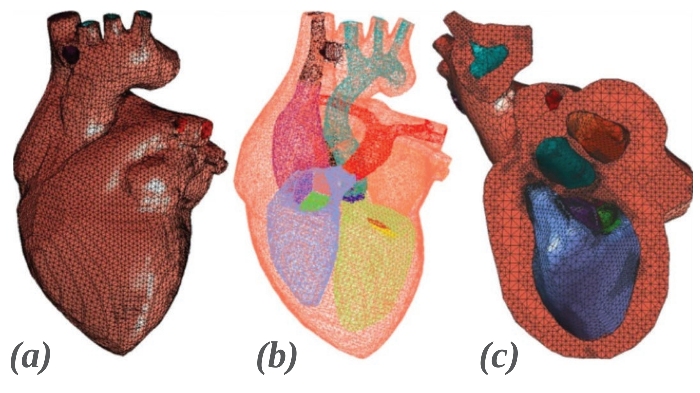


Figura 6 • Discretización del corazón y visualización de éste, gentileza de Chandrajit Bajaj, Universidad de Texas en Austin: (a) malla de tetraedros de elementos finitos; (b) visualización tipo alambre del corazón y sus componentes; (c) las válvulas y las cámaras del corazón se han pintado con distintos colores para diferenciarlas.

Figura 7 • Glasses from Wikipedia Commons: imagen fotorrealista de excelente calidad obtenida con el algoritmo de *ray tracing.*

INVESTIGACIÓN SOBRE TRIANGULACIONES EN EL DCC DE LA UNIVERSIDAD DE CHILE

Actualmente trabajamos en dos líneas principales de investigación.

• Estudio teórico de aspectos abiertos en los algoritmos Lepp-bisección y Lepp-Delaunay para refinar triangulaciones (obtención de triangulaciones más finas en zonas de interés de la geometría). Los algoritmos Lepp-bisección son formulaciones eficientes de los algoritmos basados en la bisección de triángulos (tetraedros) por la arista más larga. Permiten refinar local e iterativamente triangulaciones, manteniendo la calidad de la triangulación inicial. Se utilizan principalmente para métodos de elementos finitos. En trabajo previo se ha demostrado que estos algoritmos son robustos y eficientes (de costo lineal en el número de puntos insertados). También se han utilizado ampliamente en aplicaciones de Ingeniería. Recientemente hemos demostrado que en dos dimensiones las triangulaciones que se obtienen con el algoritmo Lepp-bisección son de tamaño óptimo (no más refinadas que lo necesario). En investigación en curso estamos trabajando también en demostrar que a partir de una triangulación con triángulos con ángulos muy pequeños (como los de la Figura 2a) se obtienen triangulaciones de buena calidad de tamaño óptimo con el algoritmo Lepp-Delaunay (ver Figura 2b).

• Diseño e implementación de algoritmos paralelos de refinamiento de triangulaciones. El objetivo es permitir el procesamiento de mallas muy grandes (decenas y centenas de millones de tetraedros) que son difíciles de manejar con algoritmos seriales (presentan problemas de memoria y tiempo de procesamiento). Recientemente hemos desarrollado algoritmos paralelos Lepp-bisección y Lepp-Delaunay 2D y 3D en ambiente multicore, que aprovechan las arquitecturas con varios núcleos de los computadores actuales. Estos algoritmos usan "randomización" para que el procesamiento de los triángulos sea independiente del orden; y "pre-fetching" para que el algoritmo sea independiente de la arquitectura del hardware. También se han desarrollado algoritmos paralelos de refinamiento de mallas sobre sistemas paralelos con memoria distribuida.

Las imágenes del encabezado de este artículo corresponden a refinamiento paralelo con el algoritmo Lepp-bisección en 3D (Rodríguez, Rivara).

Han contribuido a la investigación realizada en el DCC:

• Pedro Rodríguez, Ingeniero Civil Informático de la Universidad de Concepción, Académico de la Universidad del Bío Bío. Actualmente realiza su Tesis de Doctorado, en Ciencias de la Computación en la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile sobre la paralelización de algoritmos Lepp-bisección y Lepp-Delaunay.

• Carlos Bedregal, Bachiller en Ingeniería Informática de la Universidad Católica San Pablo del Perú, Ingeniero Informático de la misma Universidad. Actualmente realiza su Tesis de Doctorado en Ciencias de la Computación en la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile, en el tema Análisis de algoritmos Lepp-bisección y Lepp-Delaunay.

• Francisca Gallardo, Ingeniera Civil en Computación, Universidad de Chile, 2012.

• Eduardo Mercader, Ingeniero Civil en Computación, Universidad de Chile, 2012. BITS

Referencias

• M.C. Rivara, Lepp-bisection algorithms, applications and mathematical properties, Applied Numerical Mathematics, 59 (2009), 2218-2235.

• M.C. Rivara, C. Calderón, Lepp terminal centroid method for quality triangulation, Computer-Aided Design, 42 (2010) 58-66.

• D. Azócar M. Elgueta, M.C. Rivara, Automatic LEFM crack propagation method based on local Lepp-Delaunay mesh refinement, Advances in Engineering Software 41 (2010) 111-119.

• N. Coll, M. Guerrieri, M.C. Rivara, J.A. Sellares, Adaptive simplification of huge sets of terrain grid data for geosciences applications J. Computational Applied Mathematics 236 (2011) 1410-1422.

• M.C. Rivara, P. Rodríguez, R. Montenegro, G. Jorquera, Multithread parallelization of Lepp bisection algorithms, Applied Numerical Mathematics 62 (2012) 473-488.

• P. Rodríguez, M.C. Rivara, Isaac D. Sherson, Exploiting the memory hierarchy of multicore systems for parallel triangulation refinement, Parallel Processing Letters, Vol. 22, N°3, 9 pages, Septiembre 2012.

• C. Bedregal, M.C. Rivara, A study on size-optimal longest edge refinement algorithms, 21th International Meshing Roundtable, California, 7-10 October 2012, 15 pages.

• C. Bedregal, M.C. Rivara, Longest edge algorithms for quality Delaunay refinement, Computational Geometry: Young Research Form, CG: YRF, Río de Janeiro, Brasil, Junio 17-20, 2013.