



A PARALLEL POROMECHANICS FEM MODEL

Henrique C. C. Andrade

Ana B. C. G. Silva

Fernando L. B. Ribeiro

henrique_conde@coc.ufrj.br

anabeatrizgonzaga@coc.ufrj.br

fernando@coc.ufrj.br

Federal University of Rio de Janeiro

Ilha do Fundão, CEP 21945-970, Rio de Janeiro/RJ, Brazil

Samir Maghous

samir.maghous@ufrgs.br

Federal University of Rio Grande do Sul

Av. Osvaldo Aranha 99, CEP 90035-190, Porto Alegre/RS, Brazil

Abstract. *The present paper aims at developing a parallel computational model for numerical simulation of elastic poromechanics. The system of equations is solved using iterative method Symmetric Quasi-Minimal Residual with diagonal preconditioner. Compressed data structures are used to store the coefficient matrices in indefinite symmetric form. The MPI standard is used for distributed and shared memory communication in parallel implementation in a subdomain-by-subdomain approach. An example using different mesh sizes is presented to validate the model and to test the efficiency of the parallel implementation.*

Keywords: *Finite element method, Poromechanics, Poroelasticity, Reservoir Analysis.*

1 INTRODUÇÃO

Pode-se definir poro mecânica como o estudo do comportamento de materiais porosos, significativamente influenciados pelo fluido contido em seus vazios. O estudo da poro

mecânica é relevante em diferentes áreas como geofísica, biomecânica, geotecnia e ciência de matérias, entre outras (Coussy, 2004), (Coussy, 2010).

Neste artigo será utilizada a teoria linear de *Biot* sem efeitos dinâmicos, um conjunto de equações utilizadas em problemas elásticos considerando a hipótese de pequenas transformações onde os carregamentos são aplicados de forma gradual. Esse conjunto de equações é de suma importância para área aplicadas da engenharia pois o procedimento numérico utilizado para a resolução do sistema de equações é similar ao aplicado em problemas mais complexos que envolvem não linearidades físicas e geométricas (Bernaud et al., 2002), (Bernaud et al., 2006), (Brüch et al., 2016), (Brüch, 2016).

Do ponto de vista numérico, o sistema de equações poro-elásticas do problema acoplado da teoria de *Biot* na formulação em elementos finitos tem características numéricas peculiares que necessitam de cuidados especiais na resolução do problema. Nesse sistema, as matrizes de coeficientes podem ter três formas: simétrica indefinida, não-simétrica positiva definida e não simétrica indefinida (Ferronato et al., 2009). Usualmente a solução dos sistemas de equações é feita utilizando a matriz de coeficientes do problema poro-mecânico na forma simétrica indefinida por questão de armazenamento de dados. Porém, diferente do caso simétrico positivo definido (*SPD*) no qual a escolha do método dos gradientes conjugados é a mais adequada (*CG – Conjugate Gradient*), no caso simétrico indefinido a escolha do método de resolução não é bem definida. Considerando os métodos iterativos baseados em subespaço de *Krylov* para matrizes simétricas temos: métodos dos resíduos mínimos (*MINRES – Minimum Residual*), fatoração simétrica *LQ* (*SYMMLQ – Symmetric LQ*) (Paige et al., 1975), resíduos conjugados (*Conjugate Residual*) (Saad, 2003) e resíduo quase-mínimo simétrico (*SQMR – Symmetric Quasi-Minimal Residual*) (Freund et al., 1994). Dentre estes, o método *SQMR* é o único que permite o uso de um pré-condicionador simétrico indefinido, conferindo uma vantagem clara frente os outros.

Para a solução acoplada de problemas poro-mecânicos utilizando o método dos elementos finitos, as funções de interpolação dos deslocamentos devem ser de ordem superior as funções de interpolação das poro-pressões. O uso de uma interpolação linear para as poro-pressões implica no uso de interpolações no mínimo quadráticas para os deslocamentos. Para um problema tridimensional tem-se quatro graus de liberdade por nó, três deslocamentos e uma pressão. Assim, mesmo problemas com malhas da ordem de 10^5 elementos geram sistemas da ordem de 10^6 equações que precisam ser resolvidas algumas centenas de vezes, sendo comum o uso de métodos iterativos. Mesmo assim, o custo computacional é alto, sendo necessário uma implementação paralela. Dentre as diversas possibilidades atuais de paralelismo (*MPI, OpenMP, CUDA e OpenCL*), neste trabalho utilizou-se o padrão *MPI*.

Este trabalho está dividido em cinco sessões: 1) Formulação matricial do problema poro-elástico, nesta seção será apresentada a formulação matricial das equações, a formulação matricial é mais adequada para a posterior aplicação do *FEM*; 2) Formulação de elementos finitos, nesta seção será apresentada o sistema de equações advindo da aplicação direta da discretização numérica das equações do problema; 3) Implementação numérica, nesta seção será apresentado as características específicas básicas da implementação desenvolvidas para esse trabalho, como o solver utilizado, implementação em paralelo, tipos de elemento utilizado; 4) Exemplo numérico, nesta seção será apresentado a aplicação do modelo desenvolvido e do desempenho do mesmo; 5) Conclusões.

2 METODOLOGIA

2.1 Formulação do problema poro mecânico elástico

O problema poro-mecânico elástico para meios isotrópicos para pequenas transformações é constituído por duas equações diferenciais. Essas equações são a equação de equilíbrio estático e a equação de conservação de massa do fluido, ambas definidas em um meio poroso,

$$\mathbf{L}^T \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} = \mathbf{0} ; \frac{\partial(\rho^f \phi)}{\partial t} + \nabla^T (\rho^f \mathbf{q}) = 0 \quad (1)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões totais do meio poroso, ρ é a massa específica do meio poroso homogeneizado, $\mathbf{g}$ é vetor da aceleração do campo gravitacional, ρ^f é a massa específica do fluido, ϕ é a porosidade do meio e $\mathbf{q}$ o fluxo de Darcy.

Os operadores diferenciais do divergente de um tensor de segunda ordem e de um tensor de primeira ordem são definidos matricialmente respectivamente como:

$$\mathbf{L}^T = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial y & \partial/\partial x \end{bmatrix}; \nabla^T = [\partial/\partial x \quad \partial/\partial y \quad \partial/\partial z] \quad (2)$$

onde o tensor de tensões totais, fluxo de Darcy e a aceleração da gravidade são escritos respectivamente como:

$$\boldsymbol{\sigma}^T = [\sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yz} \quad \tau_{xz}]; \mathbf{q}^T = [q_x \quad q_y \quad q_z]; \mathbf{g}^T = [g_x \quad g_y \quad g_z] \quad (3)$$

Definindo a matriz $\boldsymbol{\varepsilon}$ que representa o tensor de deformação e $\mathbf{m}^T$ uma matriz estrutural, cuja única função é a compatibilidade das operações matriciais:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T = [\varepsilon_x \quad \varepsilon_y \quad \varepsilon_z \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{yz} \quad \gamma_{xz}]; \mathbf{m}^T = [1 \quad 1 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0] \quad (4)$$

as equações constitutivas para meio isotrópicos podem ser escritas na forma matricial como:

$$\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0 = \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon} - b(p - p_0) \mathbf{m} ; \phi - \phi_0 = b \mathbf{m}^T \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{p - p_0}{M} \quad (5)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}_0$ é o tensor de tensão total inicial, ϕ é a porosidade, ϕ_0 é a porosidade inicial, p é a poro-pressão do fluido, p_0 é a poro-pressão inicial do fluido, b é o coeficiente de Biot, $\mathbf{D}$ é a matriz constitutiva e M é o módulo de Biot.

A matriz constitutiva pode ser escrita em função do módulo de elasticidade E e o coeficiente de poisson ν :

$$\mathbf{D}(E, \nu) = a \begin{bmatrix} 1 & b & 0 & 0 & 0 \\ b & 1 & b & 0 & 0 \\ b & b & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{bmatrix}; \quad \begin{aligned} a &= \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ b &= \frac{\nu}{(1-\nu)} \\ c &= \frac{(1-2\nu)}{2(1-\nu)} \end{aligned} \quad (6)$$

As variáveis primitivas do problema são os deslocamentos $\mathbf{u}$ e a poro-pressão do fluido p . As deformações são correlacionadas com os deslocamentos através do operador diferencial $\mathbf{L}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L}\mathbf{u}; \mathbf{u}^T = [u_x \quad u_y \quad u_z] \quad (7)$$

A correlação do fluxo de *Darcy* com a poro-pressão toma a seguinte forma matricial:

$$\mathbf{q} = \frac{k}{\rho^f g} (-\nabla p + \rho^f \mathbf{g}) = K(-\nabla p + \rho^f \mathbf{g}) \quad (8)$$

onde k é condutividade hidráulica dada em m/s .

No problema poroelástico, as condições de contorno mecânicas são:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^d \text{ em } \Gamma^u; \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{N} = \mathbf{t}^d \quad (9)$$

Já as condições de contorno hidráulicas são:

$$p = p^d \text{ em } \Gamma^p; \mathbf{q}^T \mathbf{n} = (K(-\nabla p + \rho^f \mathbf{g}))^T \mathbf{n} = q^d \quad (10)$$

onde

$$\mathbf{N}^T = \begin{bmatrix} n_x & 0 & 0 & n_y & 0 & n_z \\ 0 & n_y & 0 & n_x & n_z & 0 \\ 0 & 0 & n_z & 0 & n_y & n_x \end{bmatrix}; \mathbf{n}^T = [n_x \quad n_y \quad n_z] \quad (11)$$

2.2 Modelo Numérico

A formulação em elementos finitos do problema utiliza o método dos resíduos ponderados clássico, ou seja, as funções de interpolação são iguais a função de ponderação (Método de *Garlekin*). O método dos resíduos ponderados é aplicado a Eq. (1) gerando as formas fracas das equações de equilíbrio como é comum em elementos finitos.

A discretização temporal das derivadas de primeira ordem é feita considerando a seguinte relação:

$$\Delta t \frac{\partial g}{\partial t} = g^{t+\Delta t} - g^t = \delta g^{t+\Delta t} \quad (12)$$

onde g é uma variável genérica e a aproximação é análoga a técnica *Euler-backward*. Essa abordagem gera um método incremental que permite facilmente o acréscimo de outros fenômenos físicos e geométricos. Aplicando o método dos elementos finitos na discretização espacial e a abordagem acima na discretização temporal chega-se a uma formulação não usual de elementos finitos onde a matriz de massa não fica explicitada (Bernaud et al. (2002), Bernaud et al. (2006), Bruch et al. (2016) e Bruch, 2016). Considerando que existem nu pontos de cálculo de deslocamentos e np pontos de poro-pressão, chega-se ao sistema de equações abaixo:

$$\mathbf{A}\Delta\mathbf{x} = \Delta\mathbf{F}; \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}^{uu} & (\mathbf{K}^{pu})^T \\ \mathbf{K}^{pu} & \mathbf{K}^{pp} \end{bmatrix}; \Delta\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{U}^{t+dt} \\ \Delta\mathbf{P}^{t+dt} \end{bmatrix}; \Delta\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{F}^u \\ \Delta\mathbf{F}^p \end{bmatrix} \quad (13)$$

com as submatrizes definidas como:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{uu} &= \left(\int_{\Omega} (\mathbf{B}^u)^T \mathbf{D}^t \mathbf{B}^u d\Omega \right)_{(3nu) \times (3nu)} & \mathbf{K}^{pu} &= - \left(\int_{\Omega} b^t (\mathbf{N}^p)^T (\mathbf{m}^T \mathbf{B}^u) d\Omega \right)_{(np) \times (3nu)} \\ \mathbf{K}^{pp} &= - \left(\int_{\Omega} \frac{1}{M^t} (\mathbf{N}^p)^T \mathbf{N}^p d\Omega + \Delta t \int_{\Omega} K^t (\mathbf{B}^p)^T \mathbf{B}^p d\Omega \right)_{(np) \times (np)} \end{aligned} \quad (14)$$

O vetor de forças é definido por:

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{F}^u &= \left(\int_{\Omega} (\mathbf{N}^u)^T (\rho^t \mathbf{g}) d\Omega + \int_{\Gamma=\Gamma^f} (\mathbf{N}^u)^T \mathbf{t}^p d\Gamma - \int_{\Omega} (\mathbf{B}^u)^T \boldsymbol{\sigma}^t d\Omega \right)_{(nu) \times (1)} \\ \Delta\mathbf{F}^p &= -\Delta t \left(\int_{\Omega} \rho^f K^t (\mathbf{B}^p)^T \mathbf{g} d\Omega - \int_{\Gamma=\Gamma^q} q^d (\mathbf{N}^p)^T d\Gamma - \int_{\Omega} K^t (\mathbf{B}^p)^T \mathbf{B}^p \mathbf{p}^t d\Omega \right)_{(np) \times (1)} \end{aligned} \quad (15)$$

onde $\mathbf{N}^u$ e $\mathbf{N}^p$ são matrizes formadas pelas funções de interpolação dos deslocamentos e poro-pressões; $\mathbf{B}^u$ e $\mathbf{B}^p$ são matrizes formadas pelas derivadas das respectivas funções de interpolação, portanto:

$$\mathbf{N}^u = [\mathbf{N}_1^u \quad \mathbf{N}_2^u \quad \dots \quad \mathbf{N}_{nu}^u]_{(3) \times (3nu)}; \mathbf{N}^p = [\mathbf{N}_1^p \quad \mathbf{N}_1^p \quad \dots \quad \mathbf{N}_{np}^p]_{(1) \times (np)} \quad (16)$$

$$\mathbf{B}^u = [\mathbf{B}_1^u \quad \mathbf{B}_2^u \quad \dots \quad \mathbf{B}_{nu}^u]_{(6) \times (3nu)}; \mathbf{B}^p = [\mathbf{B}_1^p \quad \mathbf{B}_2^p \quad \dots \quad \mathbf{B}_{np}^p]_{(3) \times (np)} \quad (17)$$

onde

$$\left(\mathbf{B}_i^u\right)^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^u}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N_i^u}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_i^u}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial N_i^u}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_i^u}{\partial x} & \frac{\partial N_i^u}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_i^u}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N_i^u}{\partial y} & \frac{\partial N_i^u}{\partial x} \end{bmatrix}; \mathbf{B}_i^p = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^p}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^p}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i^p}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Os incrementos dos deslocamentos e de poro-pressões, assim como a poro-pressão do tempo anterior são representados matricialmente respectivamente como:

$$(\Delta \mathbf{U})^T = \left[\left(\delta \mathbf{u}_1^{t+dt} \right)_{(1) \times (3)}^T \quad \left(\delta \mathbf{u}_2^{t+dt} \right)_{(1) \times (3)}^T \quad \dots \quad \left(\delta \mathbf{u}_{nu}^{t+dt} \right)_{(1) \times (3)}^T \right]_{(1) \times (3nu)} \quad (18)$$

$$(\Delta \mathbf{P})^T = \left[\delta p_1^{t+dt} \quad \delta p_2^{t+dt} \quad \dots \quad \delta p_{np}^{t+dt} \right]_{(1) \times (np)} \quad (19)$$

$$(\mathbf{p}^t)^T = \left[p_1^t \quad p_2^t \quad \dots \quad p_{np}^t \right]_{(1) \times (np)} \quad (20)$$

Em problemas elásticos com variação das propriedades constantes a matriz de coeficientes só precisa ser calculada uma única vez no início da análise. Porém para capturar casos onde a matriz de coeficientes varia com o tempo ela deve ser recalculada a cada passo de tempo, o que causa aumento do custo computacional.

2.3 Implementação numérica

Para a interpolação dos deslocamentos foi utilizado uma funções de interpolação quadráticas para deslocamentos e lineares para poro-pressões. O elemento utilizado foi o hexaedro de 20 nós, como representado na Figura 1.

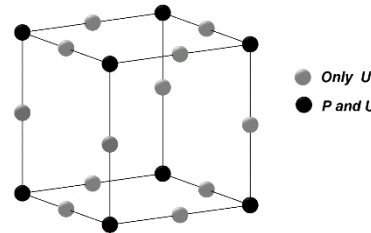


Figura 1 Tipo de elemento utilizado.

Para a resolução do sistema de equações simétrico indefinido, optou-se pelo uso do método *SQMR* com pré-condicionador diagonal (Freund et al., 1994). Caso não se consiga obter a solução o método *GMRES(l)* com re-ortogonalização (Van der Vorst, 2003) é aplicado automaticamente.

Os coeficientes globais do sistema de equações simétrico indefinido são armazenados utilizando a estrutura de dados *CSRC* (Ribeiro et al., 2007). As equações são inicialmente

numeradas tomando como base os nós de vértices, considerando os graus de liberdades de deslocamentos iguais aos de poro-pressão.

2.4 Paralelização com padrão MPI

A implementação paralela utiliza a padrão *MPI* em conjunto com uma estratégia de subdomínio por subdomínio (*SBS*) aliada com a estrutura de dados *CSRC*. A estratégia *SBS* tem como principal vantagem o código sequencial ser praticamente o mesmo do código em paralelo, e as diferenças são apenas pontuais onde as chamadas das funções do *MPI* são necessárias. Outra vantagem importante é a não alteração da convergência dos processos iterativos, salvo pequenas flutuações causadas pela aritmética de precisão finita. O impacto dessas flutuações na solução final é praticamente desprezível.

Duas técnicas de particionamento das malhas foram consideradas, de modo a evitar a comunicação durante a etapa de montagem da matriz global. A principal diferença entre as duas técnicas são os coeficientes e dimensão da matriz de cada partição. Na técnica intitulada *non-overlapping* as partições não possuem elementos compartilhados com as partições vizinhas, assim os coeficientes nas interfaces internas das partições são parciais e a matriz é quadrada, sendo armazenada utilizando o *CSRC*. Já na técnica intitulada *overlapping* as partições possuem elementos compartilhados com as partições vizinhas. Dessa forma todos os coeficientes são globais, porém a matriz dos coeficientes tem a forma retangular e o armazenamento em *CSRC* é feito na parte quadrada da matriz. O restante dos coeficientes é armazenado no formato *CSR*. Os detalhes completos dessa implementação podem ser encontrados em (Ribeiro et al., 2007) e (Ainsworth et al., 2011).

3 RESULTADOS

O exemplo escolhido para comparação com a solução analítica foi o problema clássico de consolidação unidimensional de *Terzaghi*, que consiste em uma camada de solo homogênea com dimensões horizontais infinitas e altura H que é sujeita a um carregamento distribuído externo de compressão ao longo de toda a superfície superior (Figura 3). A única superfície permeável é a superfície onde é aplicada a carga. O módulo do carregamento é dado por w . A soluções analíticas das variações das incógnitas podem ser encontradas em (Coussy, 2004), (Coussy, 2010), (Verruijt, 2013). A variação da poro-pressão normalizada e o módulo do deslocamento vertical normalizado sofrido pelo topo são dadas por:

$$\begin{aligned}\bar{p}(\bar{z}, \bar{t}) &= \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)} \cos\left(\frac{\pi(2k+1)}{2} \bar{z}\right) \exp\left(-\left(\frac{\pi(2k+1)}{2}\right)^2 \bar{t}\right) \\ \bar{s}(\bar{t}) &= \frac{w}{\lambda + 2\mu} \left(1 - \frac{8}{\pi^2} \frac{Mb^2}{\lambda + 2\mu + Mb^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} \exp\left(-\left(\frac{\pi(2k+1)}{2}\right)^2 \bar{t}\right)\right)\end{aligned}\quad (21)$$

onde as relações entre as variáveis normalizadas e não normalizado são:

$$z = H \cdot \bar{z}; s(\bar{t}) = H \cdot \bar{s}(\bar{t}); \Delta P = \frac{b \cdot M \cdot w}{\lambda + M \cdot b^2 + 2\mu} \Delta \bar{P};$$

$$C_v = \frac{k^f}{\rho^f g} M \frac{K + \frac{4}{3}\mu}{K + \frac{4}{3}\mu + Mb^2}; t_c = \frac{H^2}{C_v}$$
(22)

O problema pode ser modelado através de domínios unidimensional, bidimensional e tridimensional, e para o caso tridimensional o solo pode ser considerando como um prisma de base qualquer desde que mantidas as condições corretas de simetria. As propriedades foram retiradas de (Bernaud et al., 2002) e estão resumidas na Tabela 1.

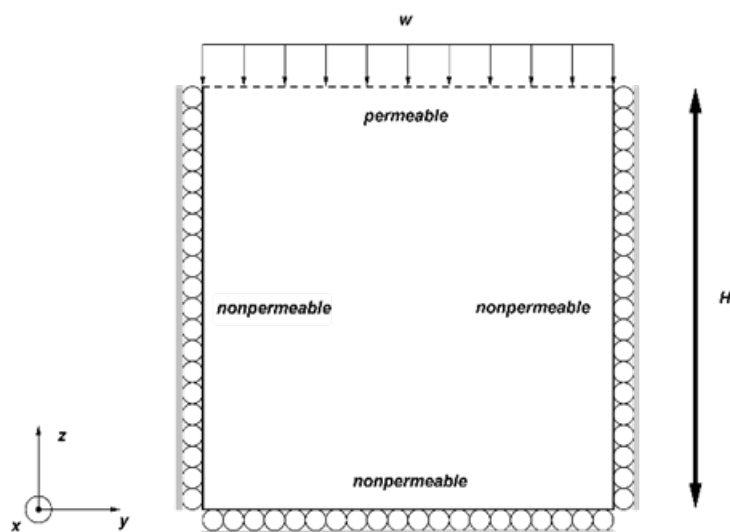


Figura 2 -Representação 2D do domínio tridimensional do problema de Terzaghi.

Tabela 1 - Propriedades poroelásticas do material do problema de Terzaghi.

Tabela 1 - Propriedades poro elásticas do material do problema de Terzaghi.		
Propriedades do material		
Módulo de Elasticidade Homogeneizado do Solo	E	16.68 MPa
Coefficiente de Poisson do Solo	ν	0.3369
Coefficiente de Permeabilidade do Solo	k	1.1×10^{-9} m/s
Coefficiente de Biot do Solo	b	0.9989
Módulo de Biot do Solo	M	5.91074×10^4 MPa

A Figura 2 mostra a representação corte vertical 2D do modelo 3D e as condições de contorno do domínio modelado via elementos finitos. O solo é um cubo de aresta 1 m. O topo da camada sofre um carregamento instantâneo w de magnitude 1.5 MPa que é mantido constante ao longo de toda a simulação. A base do domínio é uma superfície perfeitamente rígida e sem nenhum atrito horizontal. Para simular o domínio infinito condições de simetria

são utilizadas nas quatro superfícies verticais. O topo é a única superfície permeável ($p = 0$). As condições de contorno mecânicas são: deslocamentos restritos na direção x e y nas faces laterais; deslocamento restrito na direção z na face inferior ($z=0$). Na face superior ($z=1$) é aplicado uma força distribuída na direção negativa do eixo Z ($-1.5\bar{e}^z$). As condições hidráulicas são: pressão prescrita nula na face superior (permeável); fluxo de *Darcy* nulo nas faces laterais e inferior (impermeável). O efeito do campo gravitacional é desconsiderado. As condições iniciais são de pressão e tensões nulas.

As malhas foram geradas aumentando sucessivamente as discretizações em todas as arestas de um cubo de 1 m^3 . O tempo característico do processo de consolidação é de aproximadamente 4 dias. O passo de tempo utilizado na análise foi 1/100 do tempo característico ou aproximadamente 3600.0 segundos. As características das malhas de hexaedros geradas estão resumidas na Tabela 2

Tabela 2 - Malha de hexaedros para o teste da estrutura de dados.

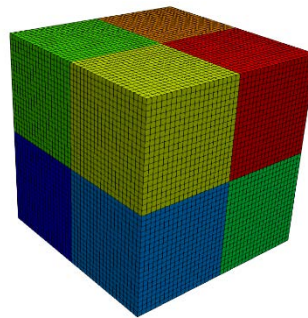
Malha	Elementos	Vertices	Nós totais	Equações	Não nulos	Div(x,y,z)
1	64.000	68.921	270.641	854.358	81.542.642	40
2	125.000	132.651	522.801	1.659.948	159.986.292	50
3	512.000	531.441	2.106.081	6.745.518	1.326.234.402	80
4	1.000.000	1.030.301	4.090.601	13.139.898	2.596.044.982	100

As simulações foram efetuadas em duas plataformas diferentes. As principais características do hardware das plataformas estão resumidas na Tabela 3. Os *speedups* foram calculados usando os tempos de execução apenas do primeiro passo. Por questões de limitação de memória por nó os testes nas malhas 3 e 4 não podem ser efetuados na plataforma *P1* para todos os números de processos. Os gráficos de *speedups* para essas malhas foram feitos considerando que o tempo em sequencial é n vezes o tempo de n processos, isto é, uma eficiência de 100%. Na malha 3 por exemplo os testes só foram efetuados a partir de 2 processos, portanto o tempo em sequencial foi considerado como sendo 2 vezes o tempo de dois processos.

Tabela 3 - Plataformas utilizadas na simulação.

	<i>Platform 1</i>	<i>Platform 2</i>
processor	E5620	E5-2630 v4
codename	Nehalem EP/Beckton	Broadwell-EP
number of nodes	10	4
Socket per node	2	2
cores/threads	4/8	10/20
cache size (L1)	4x32KB	4x32KB
cache size (L2)	4x256KB	4x256KB
cache size (L3)	12 MB	25 MB
clock	2.4 Ghz	2.2 Ghz
QPI	5.86 GT/s	8 GT/s
Memory per node	16 G RAM (DDR3 - 1.067 Mhz)	128 G RAM (DDR4 - 2.134 Mhz)
Motherboard	S5500BC	S2600CWR
LAN	InfiniBand-Qlogic (20Gbit)	Gigabit (10Gbit)

Para a execução em paralelo a malha precisa ser subdivida em partições. Um bom particionamento precisa atingir dois principais critérios: balanceamento de trabalho entre os processos, ou seja, tamanhos de partições iguais e minimização da comunicação entre as partições, ou seja, minimização das superfícies internas entre as partições. Para casos onde a malha é estruturada e o domínio é simples essa subdivisão pode ser feita simplesmente através das coordenadas. Na Figura 3 pode-se visualizar o particionamento da malha 1 utilizando 8 partições. Para casos de malhas mais gerais pode-se utilizar bibliotecas específicas, como a biblioteca *METIS*.

**Figura 3 Malha 1 dividida em 8 partições. Cada cor corresponde a uma partição.**

A Figura 4 mostra o rebaixamento do topo e a dissipação das poro-pressão na base para a malha 1. Observa-se que há uma excelente concordância com a solução analítica.

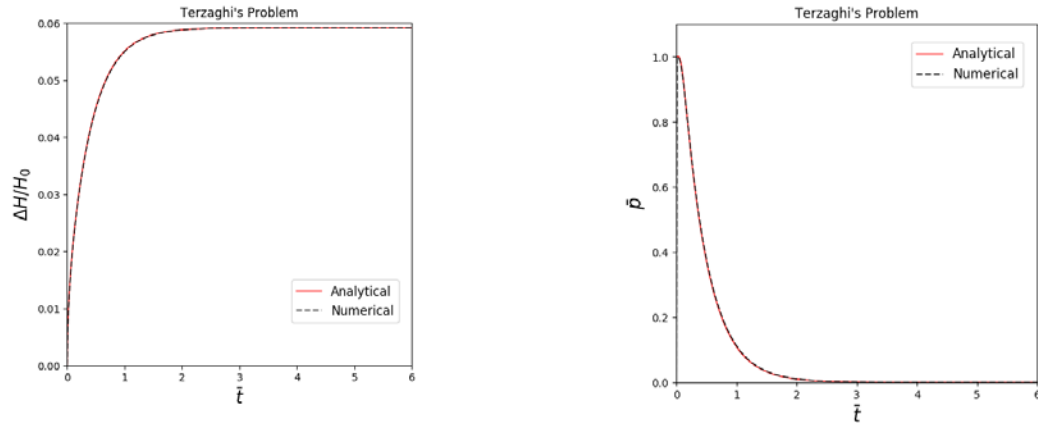


Figura 4 A esquerda o histórico do rebaixamante sofrido pelo topo ao longo do tempo. A direita o histórico da poro-pressão na base ao longo do tempo.

O tempo total de computação para toda a análise, ou seja, 1.000 passos de tempo, usando 64 cores e a técnica *overlapping*, estão resumidos na Tabela 4. Os valores em horas mostram a clara necessidade da implementação em paralelo do código. Mesmo em caso de malhas intermediárias, como é o caso da malha 2, o tempo necessário para simulação passaria de 20 dias se fosse realizado com o código sequencial.

Tabela 4 - Tempo total para 64 cores.

Mesh	Total Time in P1 (hours)	Total Time in P2 (hours)
1	3.39	1.49
2	6.18	3.26
3	36.01	15.64
4	85.53	39.60

Os gráficos na Figura 5 mostram os *speedups* da etapa de montagem dos sistemas de equações. Os *speedups* no método *non-overlapping* mostraram desempenho acima da linha do ideal. Os *speedups* no método *overlapping* mostraram desempenho inferior ao método *non-overlapping*. Com o aumento da malha os resultados do método *overlapping* vão se aproximando da curva ideal, mostrando uma excelente escalabilidade. A plataforma P2 mostra curvas de *speedups* superiores a plataforma P1. Ambas as plataforma não mostram sinais de degradação da eficiência

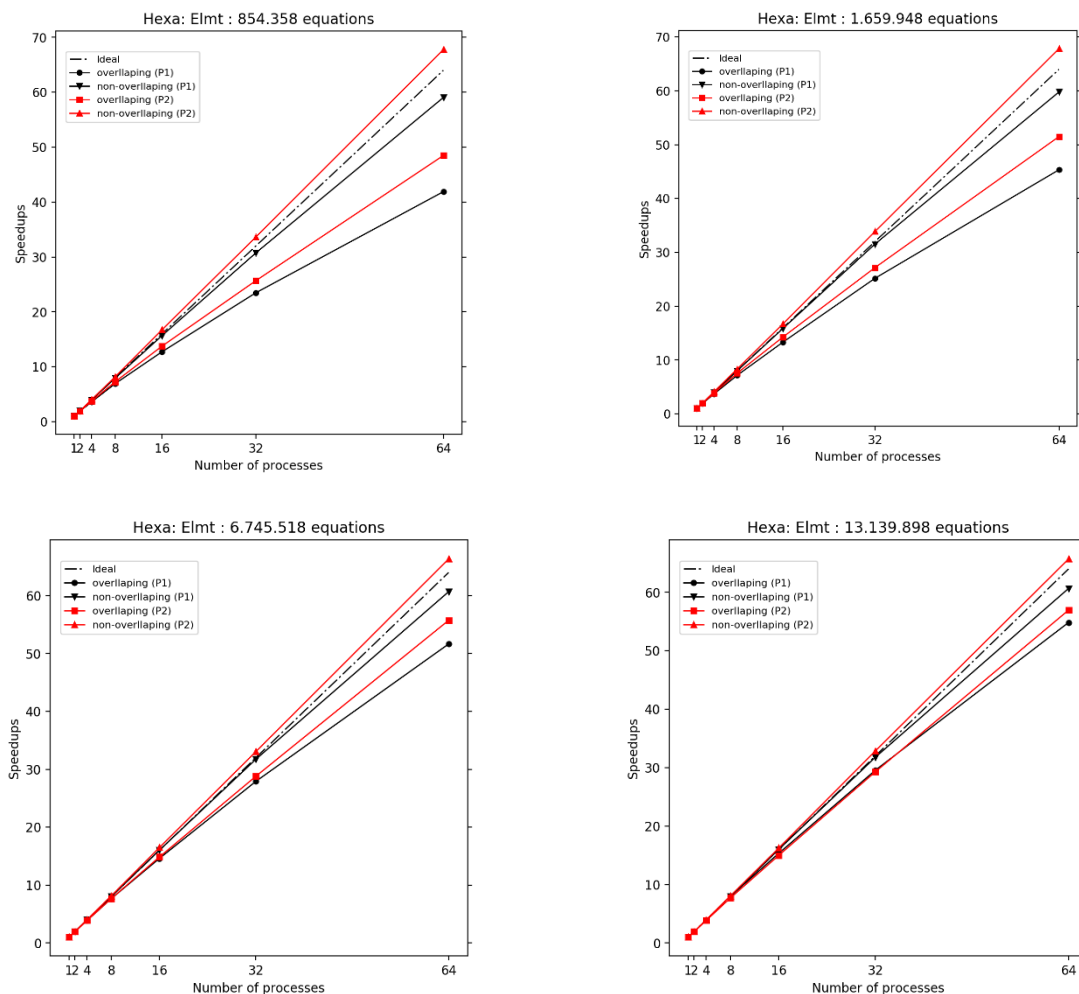


Figura 5 Curvas de speedups da etapa de montagem da matriz global. Curvas pretas são da plataforma P1. Curvas vermelhas são da plataforma P2. Os graficos são: superior esquerdo a malha 1; superior direito a malha 2; inferior esquerdo a malha 3; inferior direito a malha 4.

Os gráficos na Figura 6 mostram os *speedups* da etapa de resolução do sistema. Os *speedups* no método *non-overlapping* mostraram desempenho superior ao método *overlapping*. A plataforma P2 mostra curvas de *speedups* superiores a plataforma P1. A plataforma P1 mostra uma queda acentuada da eficiência. Já em P2 a eficiência apesar de diminuir ainda possui valores satisfatórios.

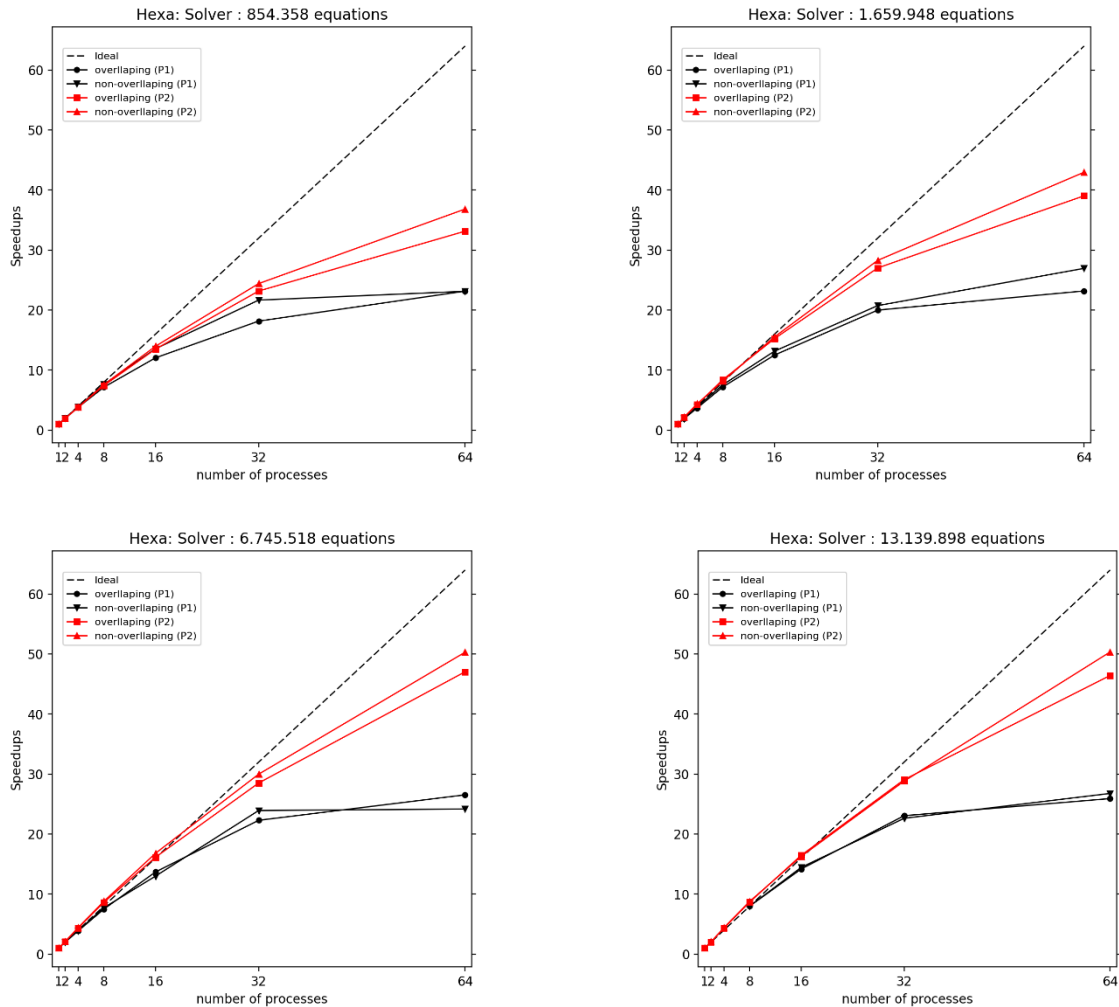


Figura 6 Curvas de speedups da etapa de resolução do sistema de equações pelo método *SQMR*. Curvas pretas são da plataforma P1. Curvas vermelhas são da plataforma P2. Os grafics são: superior esquerdo a malha 1; superior direito a malha 2; inferior esquerdo a malha 3; inferior direito a malha 4.

A diferença de comportamento entre a etapa de montagem da matriz e da resolução do sistema de equação pode ser explicado pelo custo na comunicação. Enquanto na etapa de montagem das matrizes não há qualquer comunicação entre os processos, na etapa do sistema de equações há necessidade de comunicação.

Os gráficos da Figura 7 mostram a diferença percentual do tempo de computação da etapa de montagem da matriz global entre as duas plataformas. A plataforma P1 mostrou-se sempre inferior a plataforma P2. A diferença ficou em 15-30%.

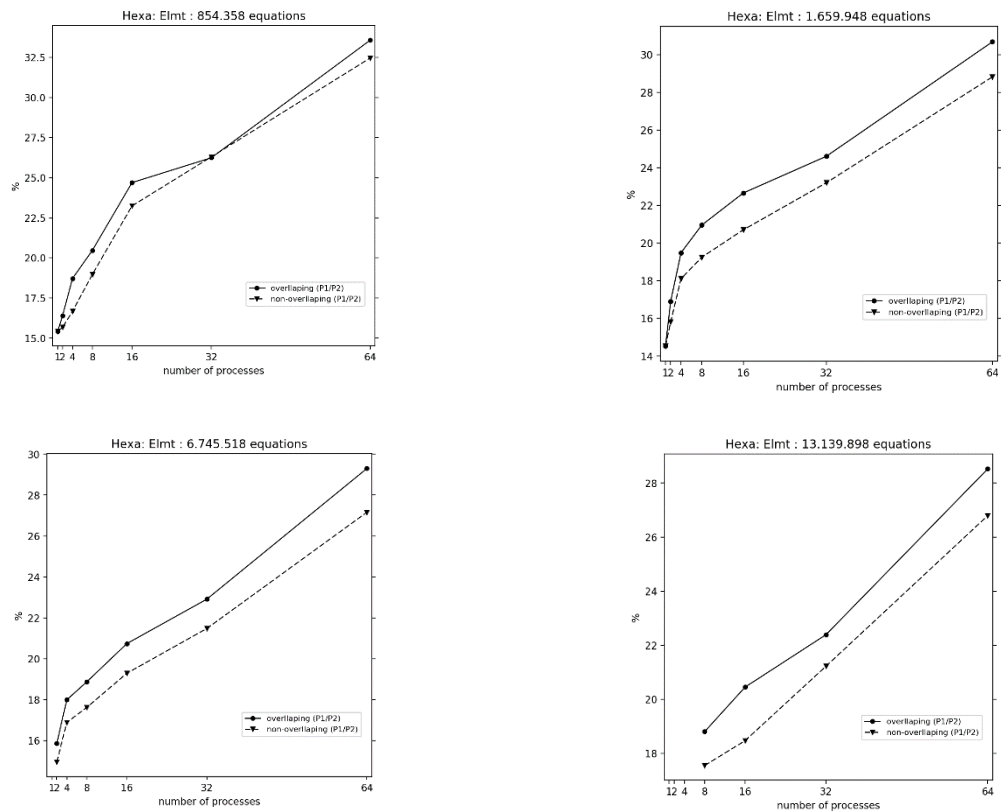
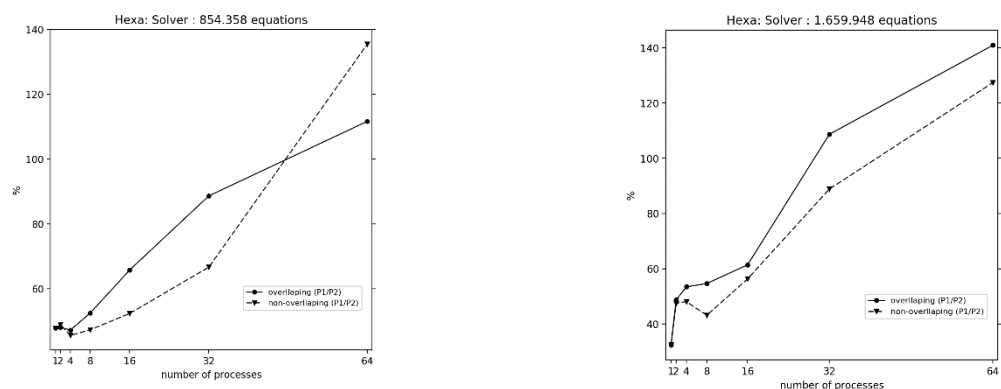


Figura 7 Comparação percentual de entre os tempos da etapa de montagem da matriz global nas plataformas P1 e P2. Os graficos são: superior esquerdo a malha 1; superior direito a malha 2; inferior esquerdo a malha 3; inferior direito a malha 4.

Os gráficos Figura 8 mostram a diferença percentual do tempo de computação da etapa de resolução do sistema de equações. A plataforma P1 mostrou-se sempre inferior a plataforma P2. A diferença ficou em 30-190%.



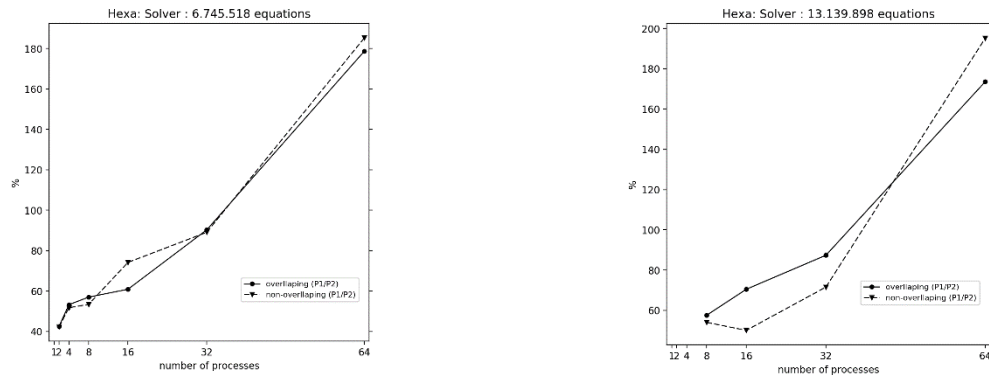


Figura 8 Comparação percentual de entre os tempos da etapa de resolução do sistema de equações nas plataformas P1 e P2. Os graficos são: superior esquerdo a malha 1; superior direito a malha 2; inferior esquerdo a malha 3; inferior direito a malha 4.

Os gráficos da Figura 10 mostram o percentual de tempo gasto em cada parte do código de elementos finitos. Os gráficos possuem 3 divisões, o cálculo e montagem da matriz de coeficiente (*Elmt*), solução do sistema de equações (*Solver*) e restante do programa (*Others*). Os gráficos são referentes apenas ao código em P2 e a técnica *overlapping*. Os outros casos são extremamente similares, por isso foram omitidos. No código sequencial a malha 1 leva 61% na etapa da montagem e 24% na resolução de sistema de equações. Já a malha 4 leva 34% na etapa da montagem e 57% na resolução de sistema de equações.

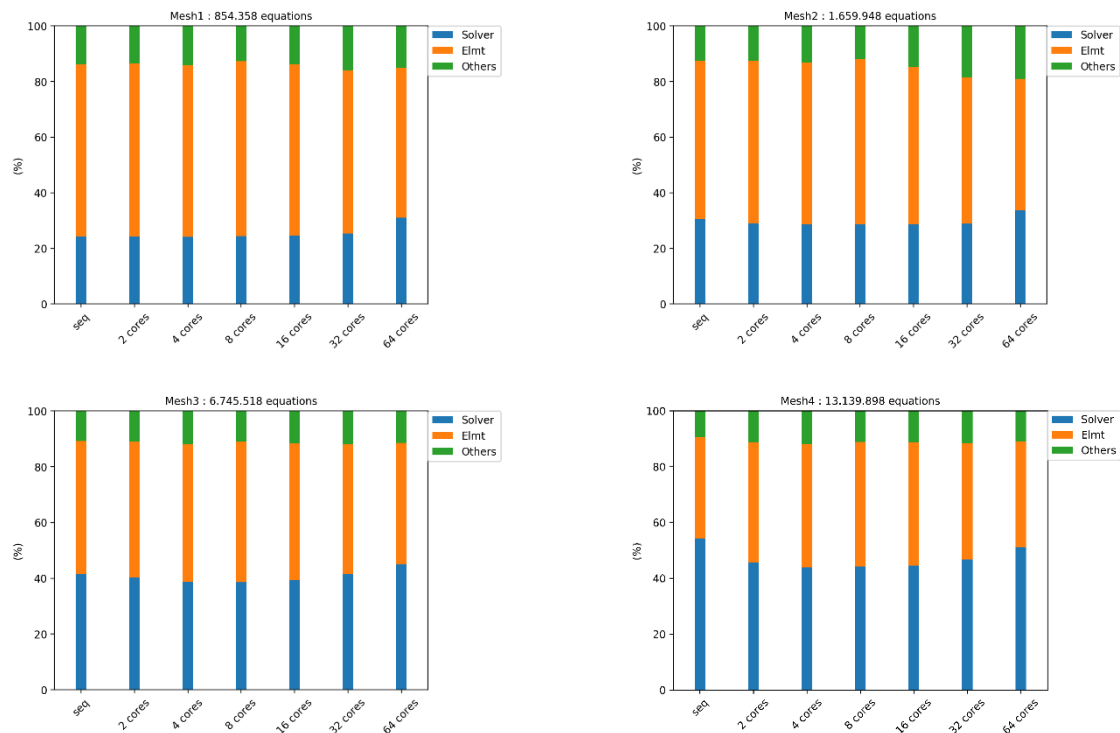


Figura 9 Percentual de tempo gasto em diferentes etapas código. Os gráficos são referentes apenas ao código em P2 e a técnica *overllaping*. Os graficos são: superior esquerdo a malha 1; superior direito a malha 2; inferior esquerdo a malha 3; inferior direito a malha 4.

4 CONCLUSÕES

O resultado obtido pelo código desenvolvido aqui apresentou excelente correspondência com a solução analítica. A abordagem da discretização temporal e cálculo da matriz de coeficientes a cada passo de tempo possibilita que o código seja facilmente expandido para incorporar não-linearidades tanto físicas quanto geométricas de maneira simples sem afetar o desempenho da implementação paralela.

O esforço computacional fica principalmente dividido entre a etapa de montagem da matriz e resolução do sistema de equações, justificando assim o foco dado nessas duas partes etapas durante a análise de resultados. Além disso, para malhas maiores a porcentagem de custo computacional gasto na resolução do sistema aumenta, indicando que para sistemas de equações maiores a resolução do sistema de equações é o principal determinante do tempo total de análise. Para problemas não-lineares essa divisão de trabalho deve se manter praticamente a mesma.

Os *speedups* na etapa de montagem de elementos apresentaram resultados excelentes. Na técnica de *non-overlapping* na plataforma P2 as curvas ficaram acima do ideal, fenômeno conhecido como *super speedup*. Já em P1 apesar das curvas não ficarem acima do ideal, elas ficaram bem próximas do ideal. Na técnica de *overlapping* a duas plataformas apresentaram desempenhos inferiores à técnica *non-overlapping*. O principal motivo disso é a redundância dos elementos sobrepostos existentes no particionamento *overlapping*. Porém em alguns casos há vantagens de se manter os coeficientes globais. A eficiência da plataforma P2 também foi superior, enquanto a plataforma P1 chegou a *speedup* de 60 para 64 processos, uma eficiência de 93%, a plataforma P2 teve *speedup* de 67 para 64 processos, uma eficiência de 104%.

Os *speedups* na etapa da solução do sistema foram satisfatórios. As curvas da plataforma P1 indica que o sistema está próximo da saturação, isto é, adicionar mais processos pode não levar ganhos significáveis, porém a plataforma P2 indica o inverso, adicionar mais processos pode levar a ganhos consideráveis. A eficiência da plataforma P2 também foi superior, enquanto a plataforma P1 teve picos de *speedups* de 25 para 64 processos, uma eficiência de 39%, a plataforma P2 teve picos de 50 para 64 processos, uma eficiência de 78%.

Apesar da frequência do processador e taxa de transferência de rede superior da plataforma P1 o melhor desempenho foi da plataforma P2, o que pode ser explicado pelo fato das especificações das plataformas serem diferentes. O tamanho de cache (L3), a frequência da memória RAM (DDR4) e a QPI (*Quickpath interconnect*) são superiores em P2, o que demonstra a importância desses parâmetros no desempenho da implementação.

Considerando os resultados obtidos a implementação usando somente a biblioteca MPI obteve resultados excelentes em uma arquitetura híbrida de memória distribuída/compartilhada. Além disso utilizando a plataforma P2, que tem o hardware mais atual, obteve-se os melhores resultados, não somente em tempo bruto de execução, mas

também em termos de eficiência. Esses resultados mostram que a abordagem de paralelização implementada pode ser utilizada de maneira mais eficiente nas máquinas atuais.

REFERÊNCIAS

- Bernaud, D., Dormieux, L. & Maghous, S., 2006. A constitutive and numerical model for mechanical compaction in sedimentary basins. *Computers and Geotechnics*, Volume 33, pp. 316-329.
- Brüch, A., Maghous, S., Ribeiro, F.L.B., Dormieux, L., 2016. A constitutive model for mechanical and chemo-mechanical compaction in sedimentary basins and finite element analysis: Mechanical and Chemo-Mechanical Compaction In Sedimentary Basins. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Volume 40, pp. 2238-2270.
- Brüch, A. R., 2016. *Simulação Numérica Tridimensional de processos de deformação em bacias sedimentares*. Porto Alegre: Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- C. C. Paige and M. A. Saunders, 1975. Solution of Sparse Indefinite Systems of Linear Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Volume Vol. 12, pp. 617-629.
- Coussy, O., 2004. *Poromechanics*.:John Wiley & Sons, Ltd.
- Coussy, O., 2010. *Mechanics and physics of porous solids*. :A John Wiley and Sons, Ltd., Publication.
- D. Bernaud, V. Deudé, L. Dormieux, S. Maghous and D. P. Schmitt, 2002. Evolution of elastic properties in finite poroplasticity and finite element analysis. *International Journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, Volume 26, pp. 845-871.
- F.L.B. Ribeiro & I.A. Ferreira, 2007. Parallel implementation of the finite element method using compressed data structures. *Computational Mechanics*, pp. 31-48.
- Ferronato, M., Pini, G. & Gambolati, G., 2009. The role of preconditioning in the solution to FE coupled consolidation equations by Krylov subspace methods. Volume 33, p. 405–423.

- Freund, R. W.; Nachtigal, N. M., 1994. *A new Krylov-subspace method for symmetric indefinite linear systems*. Atlanta, pp. 1253-1256.
- G. O. Ainsworth Jr., F. L. B. Ribeiro & C. Magluta, 2011. A parallel subdomain by implementation of the implicitly restarted Arnoldi/Lanczos method. *computational mechanics*, pp. 563-577.
- Saad, Y., 2003. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2^a ed. s.l.:SIAM.
- Van der Vorst, H, 2003. *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*.:Cambridge: Cambridge University Press.
- Verruijt, Arnold, 2013. *Theory and problems of poroelasticity*. Delft University of Technology.