



Rodrigo de Souza Lima Espinha

Suporte topológico em paralelo para malhas de elementos finitos em análises dinâmicas de fratura e fragmentação

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Informática do Departamento de Informática da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Informática.

Orientador: Prof. Waldemar Celes Filho

Rio de Janeiro

Abril de 2011



Rodrigo de Souza Lima Espinha

Suporte topológico em paralelo para malhas de elementos finitos em análises dinâmicas de fratura e fragmentação

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-graduação em Informática da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Waldemar Celes Filho

Orientador
Departamento de Informática - PUC-Rio

Prof. Marcelo Gattass

Departamento de Informática - PUC-Rio

Profa. Noemi Rodriguez

Departamento de Informática - PUC-Rio

Prof. Glaucio H. Paulino

University of Illinois at Urbana-Champaign, USA

Prof. Ricardo Farias

Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Prof. Luiz Fernando Martha

Departamento de Engenharia Civil - PUC-Rio

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador(a) Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 05 de abril de 2011

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização do autor, do orientador e da universidade.

Rodrigo de Souza Lima Espinha

Possui graduação em Engenharia de Computação e mestrado em Informática pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio), onde continuou seus estudos no programa de Doutorado em Informática. Durante a permanência nesta instituição, atuou em projetos voltados à indústria do petróleo, no laboratório de Computação Gráfica – Tecgraf/PUC-Rio.

Ficha Catalográfica

Espinha, Rodrigo de Souza Lima

Suporte topológico em paralelo para malhas de elementos finitos em análises dinâmicas de fratura e fragmentação / Rodrigo de Souza Lima Espinha; orientador: Waldemar Celes Filho. – 2011.

122 f.: il. (color.) ; 30 cm

Tese (doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Informática, 2011.

Inclui bibliografia

1. Informática – Teses. 2. Modelo de zona coesiva extrínseco. 3. Elemento coesivo. 4. Estrutura de dados topológica. 5. Malha adaptativa. 6. Simulação paralela de fratura. 7. Fragmentação. I. Celes Filho, Waldemar. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Informática. III. Título.

CDD: 004

À minha família.

Agradecimentos

A Deus, pois sem Ele nada teria sido possível.

A meus pais e esposa, Herisangela, pelo incentivo em todos os momentos.

Ao meu orientador, Prof. Waldemar Celes, pelo grande apoio, motivação e o conhecimento que me foi transmitido ao longo do curso.

Ao Prof. Glaucio Paulino, pela oportunidade única de ter convivido e aprendido muito com pessoas brilhantes durante o tempo que passei com seu grupo de pesquisa na Universidade de Illinois, e por todo o suporte recebido ao longo daquele período.

A Kyoungsoo Park, pelo apoio fundamental com as simulações numéricas de fraturas, pela paciência e amizade de uma grande pessoa como ele.

Ao laboratório Tecgraf/PUC-Rio, pela oportunidade de aprender todos os dias e de encontrar novos desafios a serem resolvidos.

A todos os colegas e amigos da PUC-Rio.

O presente trabalho foi realizado com apoio do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - Brasil

Resumo

Espinha, Rodrigo de Souza Lima; Celes Filho, Waldemar. **Suporte topológico em paralelo para malhas de elementos finitos em análises dinâmicas de fratura e fragmentação**. Rio de Janeiro, 2011. 122p. Tese de Doutorado - Departamento de Informática, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Fenômenos de propagação de fraturas e fragmentação em sólidos podem ser descritos por Modelos de Zona Coesiva e simulados com o Método dos Elementos Finitos. Entre as abordagens computacionais de recente interesse para a representação de fraturas em malhas de elementos finitos, encontram-se as baseadas em elementos coesivos. Nelas, o comportamento de fraturas é representado por elementos coesivos inseridos nas interfaces entre elementos volumétricos da malha original. Os modelos de elementos coesivos podem ser classificados como intrínsecos ou extrínsecos. Modelos intrínsecos requerem elementos coesivos pré-inseridos em todas as interfaces volumétricas passíveis de fraturas. Por outro lado, modelos extrínsecos requerem que elementos coesivos sejam inseridos de forma adaptativa, apenas onde e quando necessários. Porém, a representação de malhas tradicional (elementos e nós) não é suficiente para tratar malhas adaptativas eficientemente, o que faz necessário um suporte topológico apropriado. Em geral, modelos coesivos de fratura também requerem um alto nível de refinamento de malha, para que resultados precisos sejam obtidos. Isso implica em um consumo de memória e processamento que pode ser proibitivo a estações de trabalho tradicionais. Assim, ambientes paralelos tornam-se importantes na solução de problemas de fraturas. Entretanto, devido às dificuldades de paralelização de modelos extrínsecos, as abordagens existentes utilizam modelos intrínsecos ou implementam simulações extrínsecas baseadas em elementos coesivos pré-inseridos ou representados como atributos de elementos volumétricos. Com o objetivo de viabilizar a simulação de fraturas e fragmentação extrínsecas em grandes modelos de forma simples e eficiente, esta tese propõe o sistema ParTopS, um suporte topológico em paralelo para malhas de elementos finitos em análises dinâmicas de fratura e fragmentação. Em especial, é apresentada uma representação compacta e eficiente de malhas de fraturas distribuídas.

Elementos coesivos são representados explicitamente e tratados como elementos regulares da malha. Com base na representação de malha distribuída, propõe-se um algoritmo paralelo escalável para a inserção adaptativa de elementos coesivos em malhas bidimensionais e tridimensionais. Operações topológicas simétricas são exploradas para reduzir a comunicação entre partições de malha. O sistema ParTopS foi empregado na paralelização de simulações sequenciais extrínsecas existentes. A escalabilidade e a corretude do suporte topológico em paralelo são demonstradas através de experimentos computacionais realizados em um ambiente massivamente paralelo. Os resultados alcançados mostram que o sistema ParTopS pode ser aplicado de forma eficaz para viabilizar simulações de grandes modelos.

Palavras-chave

Modelo de zona coesiva extrínseco; elemento coesivo; estrutura de dados topológica; malha adaptativa; simulação paralela de fratura; fragmentação

Abstract

Espinha, Rodrigo de Souza Lima; Celes Filho, Waldemar. **Parallel topological support for finite element meshes in dynamic fracture and fragmentation analyses**. Rio de Janeiro, 2011. 122p. DSc Thesis - Departamento de Informática, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Fracture propagation and fragmentation phenomena in solids can be described by Cohesive Zone Models and simulated with the Finite Element Method. Among the computational approaches of recent interest for fracture representation in finite element meshes are those based on cohesive elements. In those approaches, fracture behavior is represented by cohesive elements inserted at the interfaces between volumetric (bulk) elements of the original mesh. Cohesive element models can be classified into intrinsic or extrinsic. Intrinsic models require pre-inserted cohesive elements at every volumetric interface in which fracture is allowed to happen. On the other hand, extrinsic models require that cohesive elements be adaptively inserted, wherever and whenever necessary. However, the traditional mesh representation (elements and nodes) is not sufficient for handling adaptive meshes, which makes an appropriate topological support necessary. In general, cohesive models of fracture also require a high level of mesh refinement near crack tips, such that accurate results can be achieved. This implies in memory and processor consumption that may be prohibitive for traditional workstations. Thus, parallel environments become important for the solution of fracture problems. However, due to the difficulties for the parallelization of extrinsic models, the existing approaches use intrinsic models or implement extrinsic simulations based on pre-inserted cohesive elements or cohesive elements represented as attributes of volumetric elements. In order to allow fracture and fragmentation simulations of large models in a simple and efficient way, this thesis proposes the ParTopS system, a parallel topological support for finite element meshes in dynamic fracture and fragmentation analyses. Specifically, a compact and efficient representation of distributed fracture meshes is presented. Cohesive elements are explicitly represented and treated as regular elements in the mesh. Based on

the distributed mesh representation, we propose a scalable parallel algorithm for adaptive insertion of cohesive elements in both bidimensional and tridimensional meshes. Symmetrical topological operations are exploited in order to reduce communication among mesh partitions. The ParTopS system has been employed in order to parallelize existing serial extrinsic simulations. The scalability and correctness of the parallel topological support is demonstrated through computational experiments executed on a massively parallel environment. The achieved results show that ParTopS can be effectively applied in order to enable simulations of large models.

Keywords

Extrinsic cohesive zone model; cohesive element; topological data structure; adaptive mesh; parallel fracture simulation; fragmentation

Sumário

1	Introdução	12
1.1.	Objetivo	15
1.2.	Contribuições	16
1.3.	Organização deste documento	17
2	Trabalhos relacionados	18
2.1.	Atualização de dados compartilhados por múltiplas partições	18
2.2.	Particionamento da malha de elementos finitos	20
2.3.	Malhas adaptativas	21
2.4.	Estruturas de dados topológicas para malhas distribuídas dinâmicas	22
2.4.1.	MDB/PMDB	23
2.4.2.	AOMD/PAOMD	23
2.4.3.	FMDB	24
2.4.4.	LibMesh	25
2.4.5.	SIERRA	25
2.4.6.	ParFUM	26
2.5.	Simulações paralelas de fraturas coesivas extrínsecas	28
2.6.	TopS	30
2.6.1.	Entidades topológicas	31
2.6.2.	Elementos coesivos	34
2.6.3.	Inserção adaptativa sequencial de elementos coesivos	36
2.6.4.	Conjuntos de atributos <i>densos</i> e <i>esparcos</i>	38
3	ParTopS: suporte topológico compacto em paralelo para representação de fraturas	40
3.1.	Representação de malha distribuída	40
3.1.1.	Camada de comunicação	41
3.1.2.	Construção da camada de comunicação	48
3.1.3.	Vizinhança de uma partição	49
3.1.4.	Representação distribuída de atributos	52
3.2.	Inserção dinâmica de elementos coesivos em paralelo	54
3.2.1.	Operações topológicas simétricas	54

3.2.2. Descrição do algoritmo paralelo	55
3.2.2.1. Inserção sequencial de elementos coesivos (Fase 1)	57
3.2.2.2. Atualização das entidades <i>proxies</i> criadas (Fase 2)	59
3.2.2.3. Atualização das entidades <i>ghosts</i> afetadas (Fase 3)	61
3.2.3. Interface para a inserção de elementos coesivos	67
3.2.4. Análise de escalabilidade	68
4 Simulações de fraturas extrínsecas em ambientes paralelos	70
4.1. Requisitos de sincronização de entidades	70
4.2. Estrutura da simulação sequencial	72
4.3. Padrões de computação	74
4.4. Computações simétricas	75
4.4.1. Computações elementos-a-nó simétricas com iteradores estáveis	76
4.5. Interface de programação paralela	78
4.5.1. Funções exportadas à aplicação numérica	79
4.5.2. Implementação da interface de programação	80
4.6. Estrutura da simulação paralela	83
4.6.1. Abordagem baseada em computações apenas em entidades locais	84
4.6.2. Abordagem baseada em computações replicadas	87
4.6.3. Abordagem baseada em computações simétricas	89
4.6.4. Abordagem mista	90
5 Experimentos computacionais	92
5.1. Representação topológica de fraturas e fragmentação em paralelo	92
5.1.1. Corretude e eficiência	93
5.1.2. Escalabilidade	99
5.2. Simulações numéricas em paralelo	101
5.2.1. Comparação entre abordagens paralelas	102
5.2.2. Desempenho em relação à simulação sequencial	103
5.2.3. Desempenho relativo	106
5.2.4. Escalabilidade	109
5.2.5. Simulação de fraturas com microrramificações	111
6 Conclusão	115
6.1. Trabalhos futuros	116
7 Referências bibliográficas	118