

1 Introdução

Simulações numéricas computacionais são importantes para a análise de problemas complicados de engenharia. Grande parte desses problemas está relacionada à solução de sistemas de equações diferenciais parciais em domínios geométricos contínuos. Um método numérico muito utilizado para isso é o *Método dos Elementos Finitos (MEF)* (Zienkiewicz et al., 2005). Nesse método, o domínio geométrico é discretizado por um conjunto finito de subdomínios, ou *elementos*, interconectados através de pontos chamados *nós*; o conjunto de elementos e nós forma uma *malha*. A malha, mais as propriedades de domínio a ela associadas para a solução do problema numérico, é chamada *modelo de elementos finitos*. Uma aproximação numérica para uma solução do sistema de equações diferenciais é, então, calculada com base no domínio discreto representado pelo modelo de elementos finitos.

Uma das principais aplicações do MEF é na solução de problemas na área de mecânica estrutural (Zienkiewicz et al., 2005; Cook et al., 2001). Neste caso, uma simulação numérica (ou *análise de elementos finitos*) é realizada a fim de se obter resultados para grandezas físicas como deslocamentos, deformações e tensões, em resposta a cargas aplicadas a uma estrutura.

Fenômenos de propagação de fraturas e fragmentação podem ser modelados através de *Modelos de Zona Coesiva* (Xu & Needleman, 1994; Camacho & Ortiz, 1996; Zhang & Paulino, 2005; Park et al., 2009), e simulados com base no MEF. Entre as principais abordagens computacionais para a representação de fraturas a partir de modelos de zona coesiva, encontram-se as que empregam elementos especiais, chamados *coesivos*. Nessas abordagens, elementos coesivos são usados para representar o comportamento de fraturas, enquanto que os elementos volumétricos tradicionais representam deformações do meio contínuo. Os elementos coesivos são inseridos nas interfaces entre pares de elementos volumétricos adjacentes na malha de elementos finitos.

Os modelos baseados em elementos coesivos podem ser classificados como: *intrínsecos* ou *extrínsecos*. Na abordagem *intrínseca* (Xu & Needleman, 1994), elementos coesivos possuem uma resposta inicial elástica, como ilustrado pela curva de tração-separação da Figura 1a. A partir da origem, a tração T

aumenta em relação à separação δ , até alcançar um valor máximo σ_c , que corresponde ao ponto limite para o início de fratura. Após esse ponto, a tração diminui até o momento em que a separação alcança o valor δ_c , no qual se considera ter ocorrido uma completa separação (ou decoesão). De forma geral, modelos intrínsecos requerem que elementos coesivos estejam presentes nas interfaces entre todos os elementos volumétricos da malha, ou de toda a região onde haja a possibilidade de ocorrência de fraturas, antes do início da simulação, pois a trajetória da fratura não é conhecida *a priori*. Após o início da simulação, não é mais necessário modificar a topologia da malha. Modelos *extrínsecos* (Camacho & Ortiz, 1996; Ortiz & Pandolfi, 1999; Park et al., 2009), por outro lado, requerem que elementos coesivos sejam inseridos de forma adaptativa nas interfaces entre elementos volumétricos, apenas onde e quando necessários (i.e., quando um critério de fratura é alcançado). Dessa forma, somente a parte da curva de tração-separação relativa à fratura é representada, como mostrado na Figura 1b, evitando-se assim um comportamento artificial antes da ocorrência da fratura (Klein et al., 2001). Durante a evolução da simulação numérica, determina-se se o critério de fratura foi alcançado para as interfaces entre cada par de elementos volumétricos do modelo de elementos finitos. Em caso positivo, elementos coesivos são criados. Com isso, fraturas podem se propagar ou ocorrer espontaneamente, conforme ditado pela física do problema; isso é ilustrado na Figura 2.

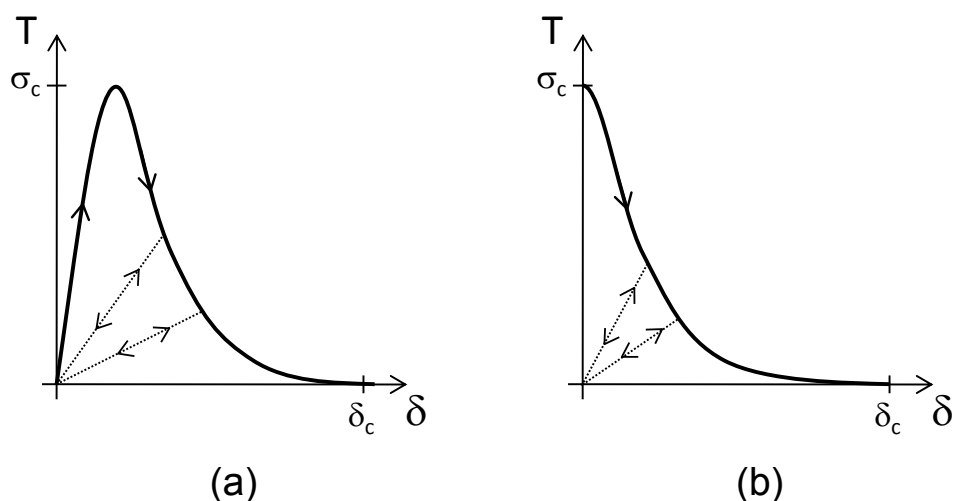


Figura 1 - Curvas da tração (T) em função da separação (δ) para: (a) modelos coesivos intrínsecos; e (b) modelos coesivos extrínsecos. Para efeito de ilustração, assume-se descarregamento / recarregamento elástico (linhas pontilhadas).

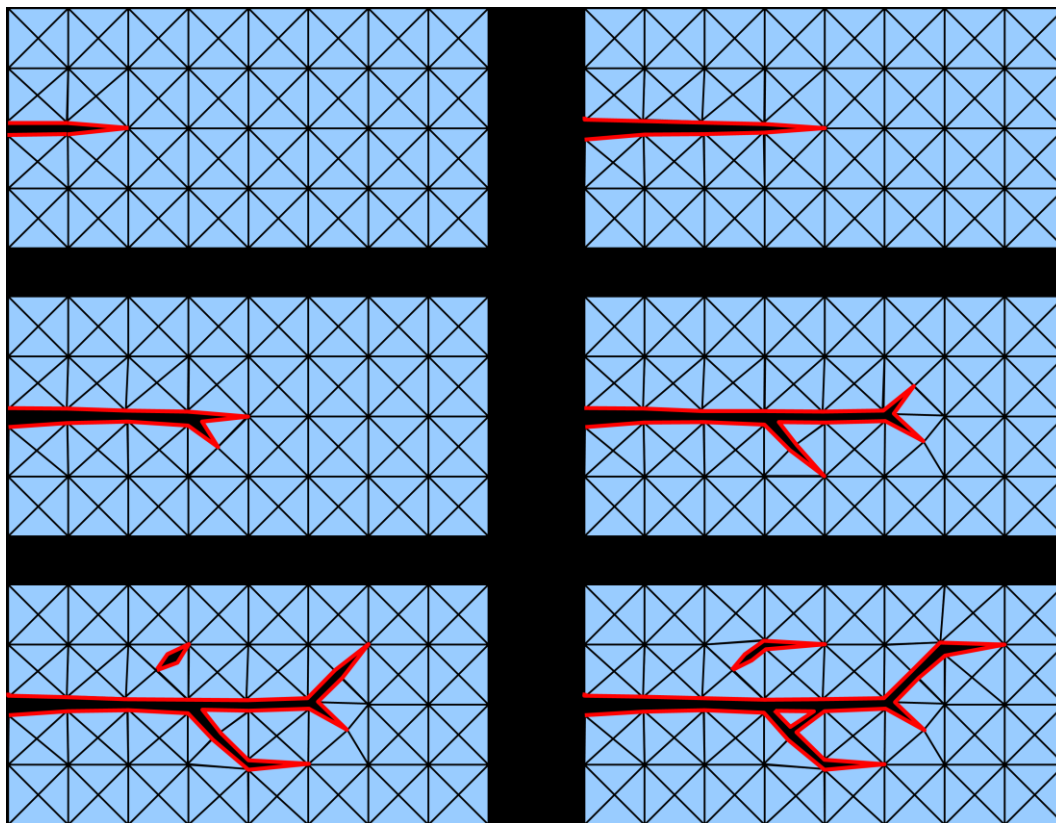


Figura 2 - Propagação e ocorrência espontânea de fraturas em uma malha de triângulos.

A representação de malha tradicionalmente utilizada em análises de elementos finitos consiste em uma tabela com as posições dos nós e outra com as incidências nodais dos elementos da malha. Embora a representação tradicional seja apropriada para diversas aplicações, ela não é suficiente em análises adaptativas (Beall & Shephard, 1997; Garimella, 2002; Celes et al., 2005a), nas quais a geometria e a topologia da malha podem se alterar durante a evolução da simulação numérica. Simulações dinâmicas de fraturas baseadas em modelos de zona coesiva extrínsecos (Camacho & Ortiz, 1996; Ortiz & Pandolfi, 1999; Park et al., 2009) requerem que *facet*s (i.e., arestas em 2D e faces em 3D) fraturadas sejam eficientemente identificadas (Pandolfi & Ortiz, 1998, 2002; Owen & Shephard, 2003; Celes et al., 2005a; Paulino et al., 2008), de forma que elementos coesivos sejam inseridos dinamicamente entre os elementos volumétricos adjacentes a elas. Durante a inserção de elementos coesivos, a duplicação de nós da malha pode também ser necessária. Isso requer uma estrutura de dados apropriada (Celes et al., 2005a; Paulino et al., 2008), que permita obter de forma eficiente relações de adjacências entre

entidades topológicas e realizar a inserção de elementos coesivos de maneira consistente.

Modelos coesivos de fratura, em geral, requerem um alto nível de refinamento de malha em regiões ao redor de pontas de fraturas, de forma que o comportamento não linear nessas regiões possa ser corretamente capturado (Zhang, 2007). Além disso, a direção de propagação de fraturas tende a ser altamente dependente do nível de refinamento (Zhang et al., 2007; Papoulia et al., 2006). Devido às limitações dos recursos computacionais atuais, modelos de dimensões reduzidas são utilizados (Zhang et al., 2007). Porém, estes não permitem reproduzir os experimentos originais completamente, devido a escalas de comprimento dependentes de material (Zhang et al., 2007). Dessa forma, para se obterem resultados precisos e pouco sensíveis à malha utilizada, é necessária uma grande quantidade de memória e poder de processamento. Uma vez que o custo das simulações pode se tornar proibitivo para estações de trabalho tradicionais, ambientes paralelos se tornam uma ferramenta importante para a solução eficaz de problemas de propagação de fraturas.

A paralelização de simulações numéricas permite contornar as limitações de capacidade de memória e/ou processamento impostas pelas abordagens sequenciais tradicionais. Porém, também apresenta alguns desafios a serem tratados, para que possa ser vantajosa em relação às abordagens sequenciais. Entre eles, encontram-se: o desenvolvimento de métodos numéricos paralelos, a representação eficiente de malhas distribuídas, e a paralelização de técnicas de refinamento de malha adaptativo, com o correspondente balanceamento dinâmico da carga dos processadores. Simulações de fraturas baseadas em elementos coesivos, em especial os modelos extrínsecos, apresentam desafios adicionais, como a representação e inserção adaptativa de elementos coesivos em paralelo, que incluem a manutenção da topologia da malha e propagação de mudanças topológicas para elementos vizinhos de forma consistente e eficiente.

1.1. Objetivo

Esta pesquisa teve como objetivo o desenvolvimento de um suporte topológico que ofereça ferramentas para a representação de malhas distribuídas em ambiente paralelo, com os operadores topológicos necessários à realização de simulações dinâmicas de fraturas e fragmentação baseadas em modelos de zona coesiva extrínsecos.

1.2. Contribuições

As seguintes contribuições são apresentadas por este trabalho:

1. *Representação compacta e eficiente de malhas distribuídas para simulações de fratura e fragmentação extrínsecas.* É apresentado o sistema ParTopS (Espinha et al., 2009), que fornece uma representação compacta para malhas distribuídas de elementos finitos utilizadas em simulações de fraturas e fragmentação extrínsecas. Diferentemente de abordagens anteriores, elementos coesivos são representados explicitamente e tratados como entidades regulares da malha de elementos finitos.
2. *Um algoritmo paralelo eficiente e escalável para a inserção dinâmica de elementos coesivos em paralelo* (Espinha et al., 2009). No algoritmo proposto, elementos coesivos são tratados de maneira uniforme, tanto em malhas bidimensionais (2D) como tridimensionais (3D), e podem ser inseridos entre diferentes tipos de elementos (ex. T3 (triângulo linear), T6 (triângulo quadrático), Tet4 (tetraedro linear), Tet10 (tetraedro quadrático), Brick8 (hexahedro linear) e Brick20 (hexahedro quadrático), entre outros). A inserção é feita de forma adaptativa, *onde e quando* determinado pela simulação, conforme requerido pelo modelo coesivo extrínseco. O sincronismo topológico entre partições de malha é baseado em *operações simétricas e comunicação em lote (batch)*. Isso permite reduzir a comunicação entre partições para a propagação de alterações topológicas, e eliminar a necessidade de acesso exclusivo (*locks*) a entidades topológicas (*lock-free approach*) ou aquisições temporárias das mesmas por uma partição.
3. *Simulações computacionais paralelas escaláveis de problemas de propagação de fratura tridimensionais baseados em modelos extrínsecos.* Simulações sequenciais são paralelizadas com base na representação de malha distribuída proposta neste trabalho, mostrando que modelos coesivos extrínsecos podem ser simulados de forma escalável. *Computações simétricas* são empregadas para a redução da sincronização de dados entre partições de malha.

1.3. Organização deste documento

Este documento é organizado da forma descrita a seguir. O Capítulo 2 apresenta os trabalhos presentes na literatura relacionados a esta pesquisa. São revistos os sistemas existentes para a representação de malhas distribuídas gerais, e discutidas abordagens recentes para o tratamento de simulações de fraturas extrínsecas. A estrutura de dados topológica sequencial TopS (Celes et al., 2005a, b; Paulino et al., 2008) também é brevemente revisitada. No Capítulo 3, propõe-se o sistema ParTopS, que oferece um suporte topológico para a representação de fraturas em paralelo. São apresentados uma representação distribuída de malhas de fraturas dinâmicas e um algoritmo para a inserção adaptativa de elementos coesivos em paralelo, baseado na representação de malha distribuída proposta. O Capítulo 4 descreve a interface fornecida por ParTopS para o desenvolvimento de simulações numéricas propagação de fraturas e fragmentação em paralelo e discute abordagens para a paralelização de uma aplicação existente. Resultados de experimentos computacionais que demonstram e validam o suporte topológico ParTopS são discutidos no Capítulo 5. O Capítulo 6 conclui este documento e apresenta direções para possíveis trabalhos futuros.