

# Formulaciones de Elementos Finitos Para La Ecuación de Darcy: Aspectos teóricos, numéricos y computacionales

P. Devloo<sup>1</sup> V. Oliari<sup>1</sup> R. Hancoo<sup>1</sup>

<sup>2</sup>Departamento de Matemática  
Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa

<sup>1</sup>Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo  
Universidade de Campinas

SEMINARIO INTERNACIONAL DE MATEMÁTICAS - 2022  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN AGUSTÍN

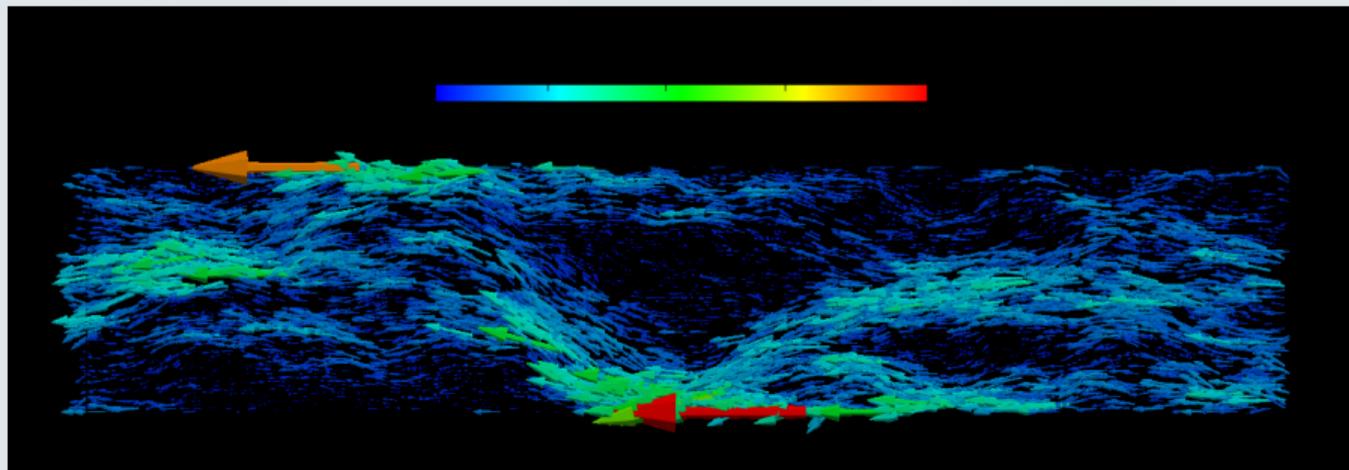
# Summary

- 1 Introducción
- 2 Principales Etapas en la Aplicación del MEF
- 3 Problemas: Difusión - Flujo en medios porosos
- 4 Algunas Formulaciones del MEF
- 5 Convergencia y aceleración de la convergencia del MEF
- 6 Paralelización del proceso de ensamblaje de la matriz FEM

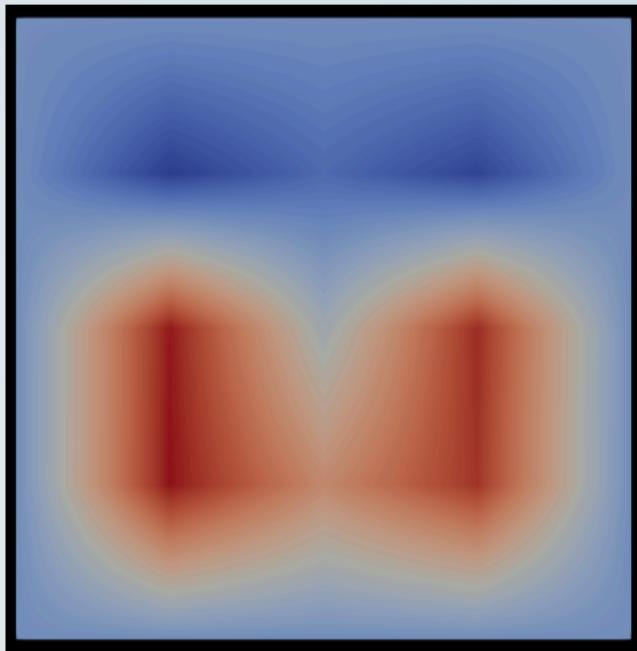
# Simulación numérica

Explotación de modelos matemáticos acoplando la potencia de la informática

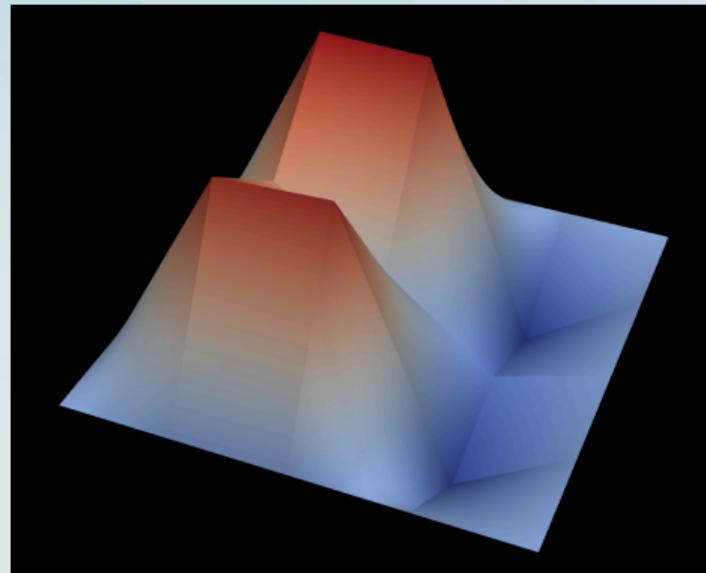
- Comprensión
- Diseño
- Predicción
- Optimización



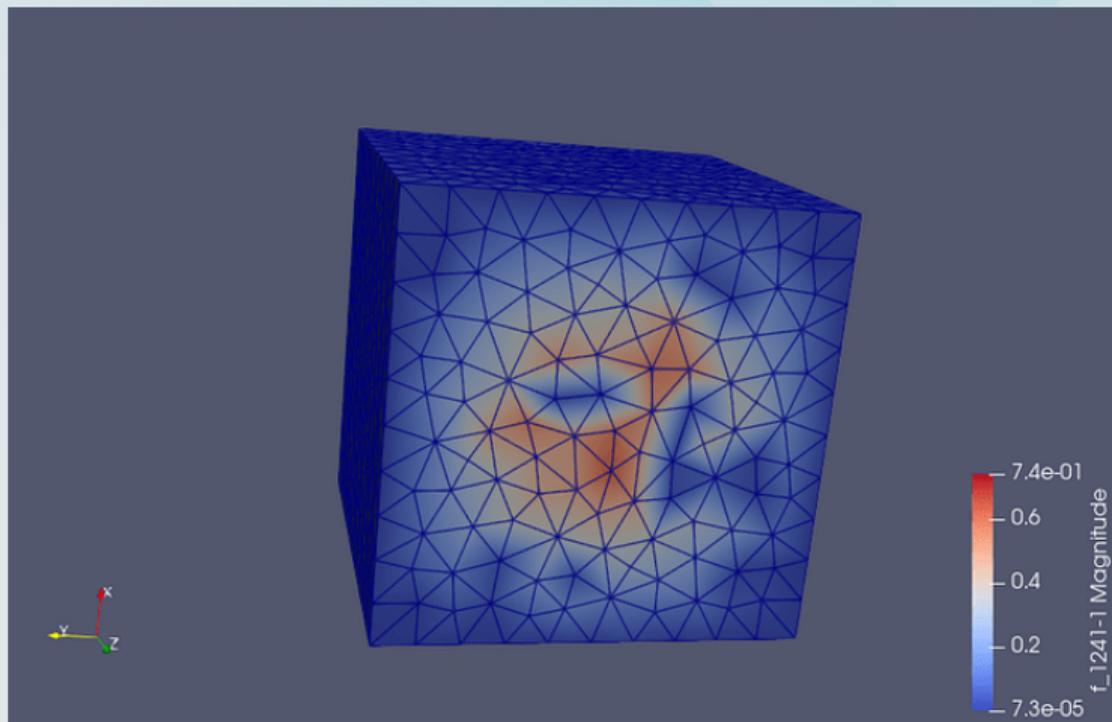
# $u_h(x, y)$ - Solución numérica del MEF



Gráfica de densidad

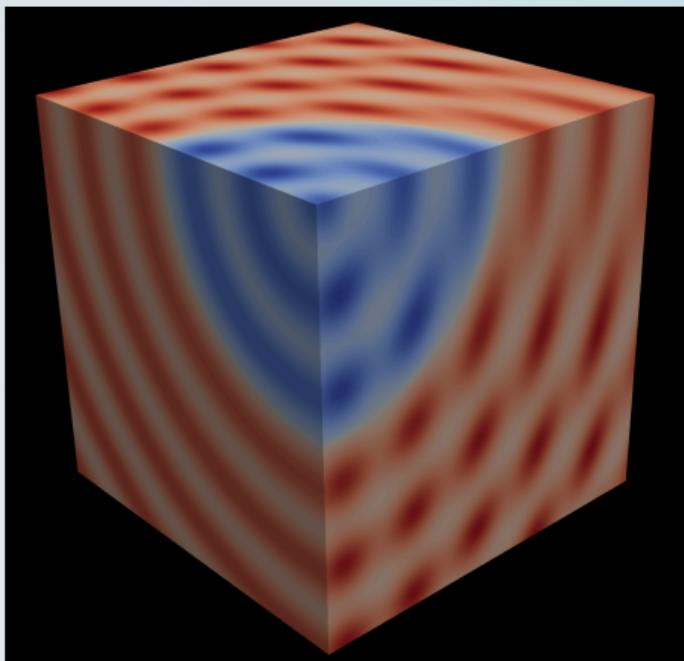


Gráfica superficie

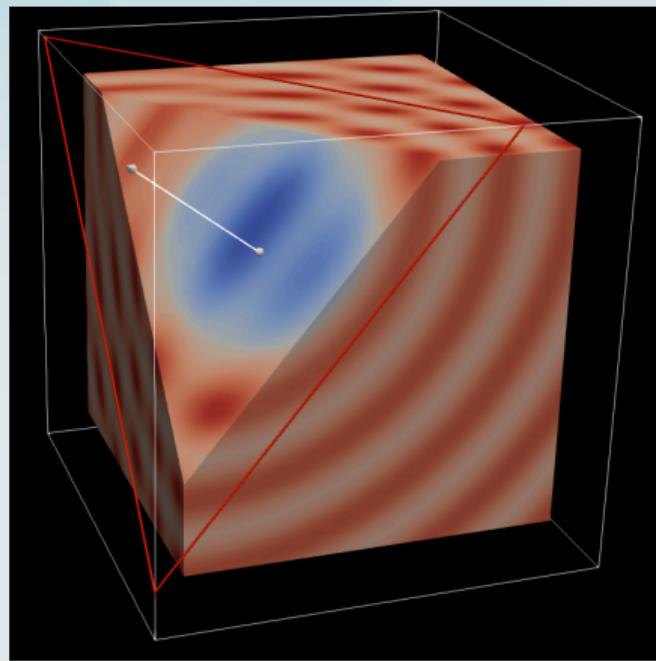
$u_h(x, y, z)$  - Solución numérica del MEF

Gráfica de densidad

# Aproximación por el MEF

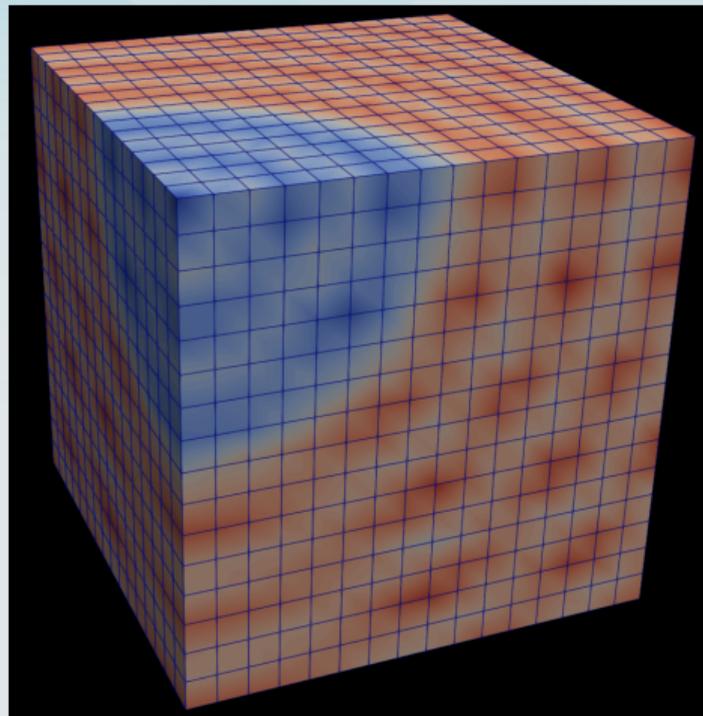
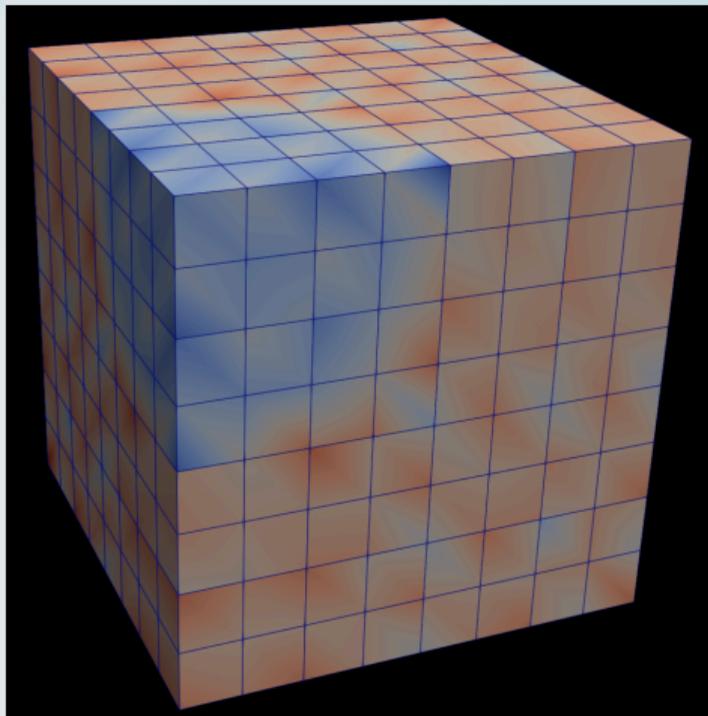


Solución exacta



Solución exacta cortada

# Solución numérica por MEF



# Algunas Familias de Métodos de Elementos Finitos

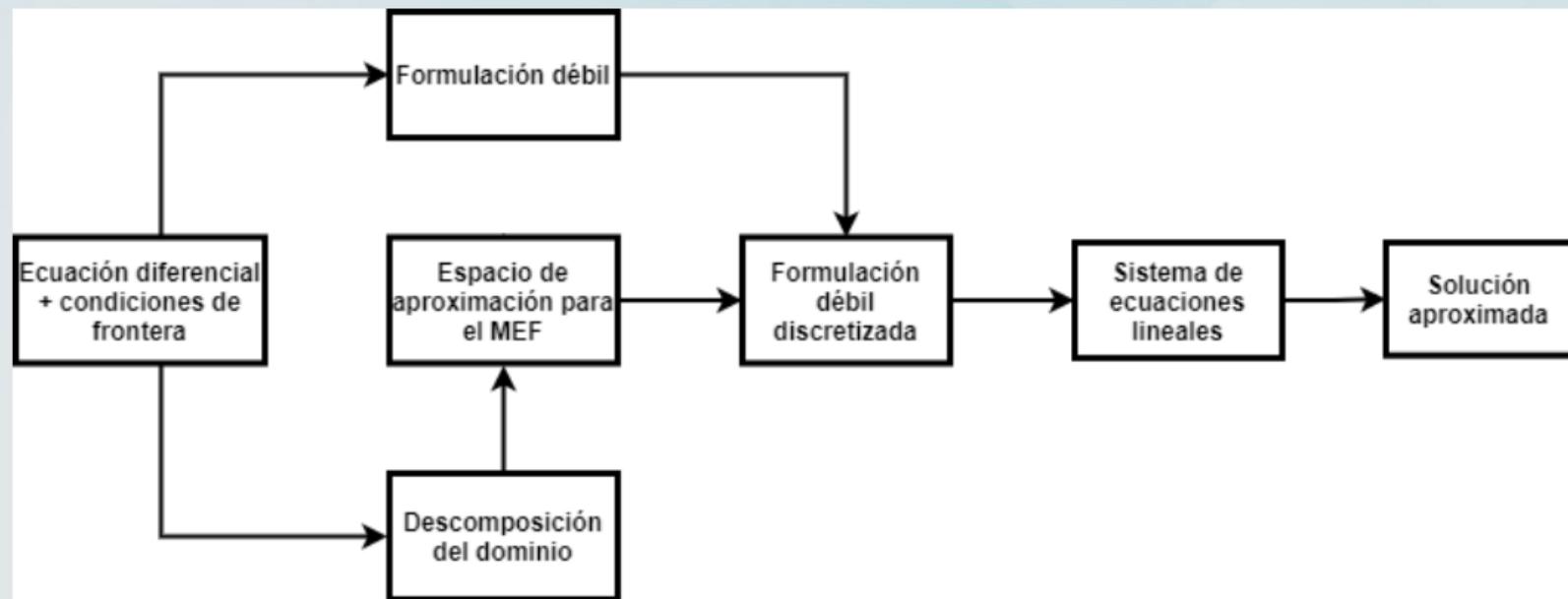
- MEF clásico
- Galerkin discontinuo
- Híbrido primal
- MEF Mixto
- MEF Mixto híbrido
- MEF exóticos
- MEF Galerkin enriquecido
- MEF multiescala

# Computación científica del MEF a gran escala

## Explotación de los recursos computacionales

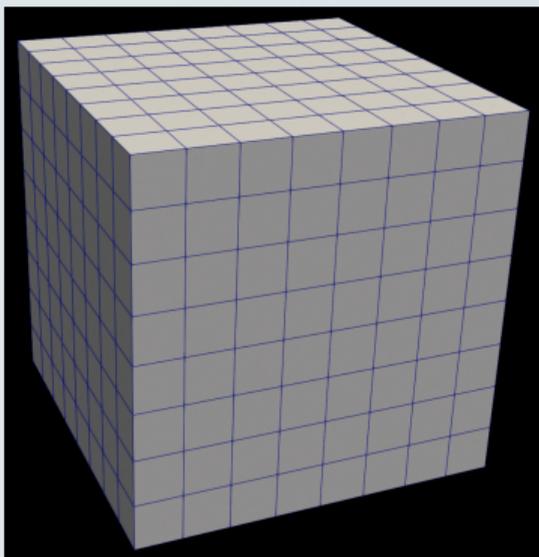
- Lenguajes de programación orientado a objetos (C++, Python, Fortran)
- Ambientes de computacionales (NeoPZ, Deal II, SfePy )
- Estructura de datos
- Computación paralela (Memoria distribuida, memoria compartida)
- Librerías de Álgebra Lineal Numérica (MKL-Intel, Pardiso, Mumps, Eigen, Metis)
- Herramientas de desarrollo de software

## Principales Etapas en la Aplicación del MEF

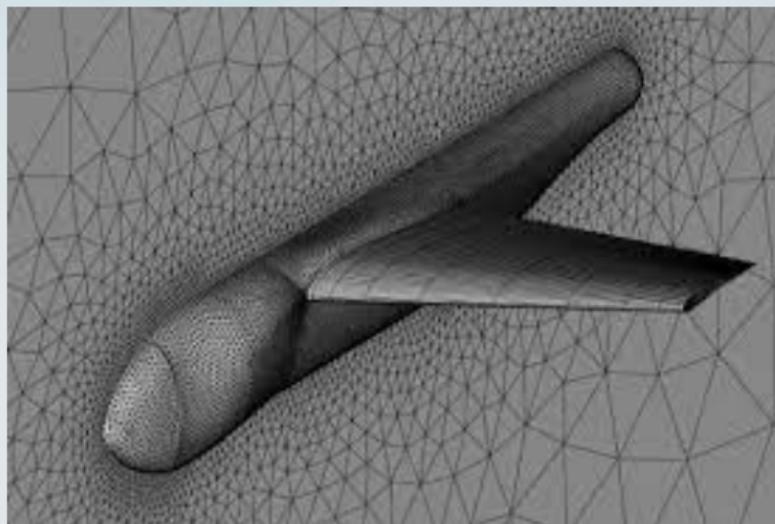


## Descomposición del dominio espacial $\Omega$

Elementos de tipo: punto, segmento, triángulo, cuadrilátero, tetraedro, pirámide, prisma y hexaedro.

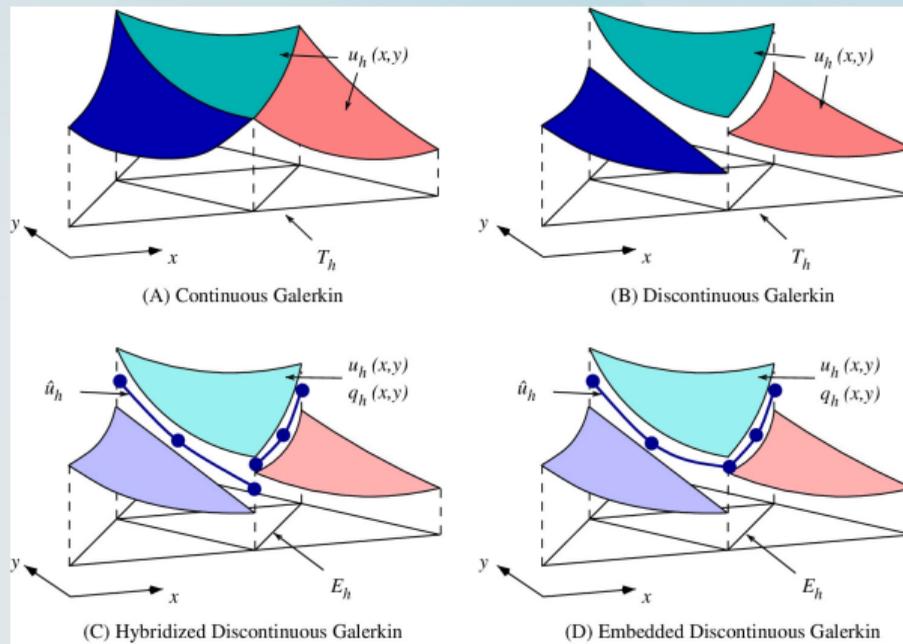


Fuente: Elaboración propia



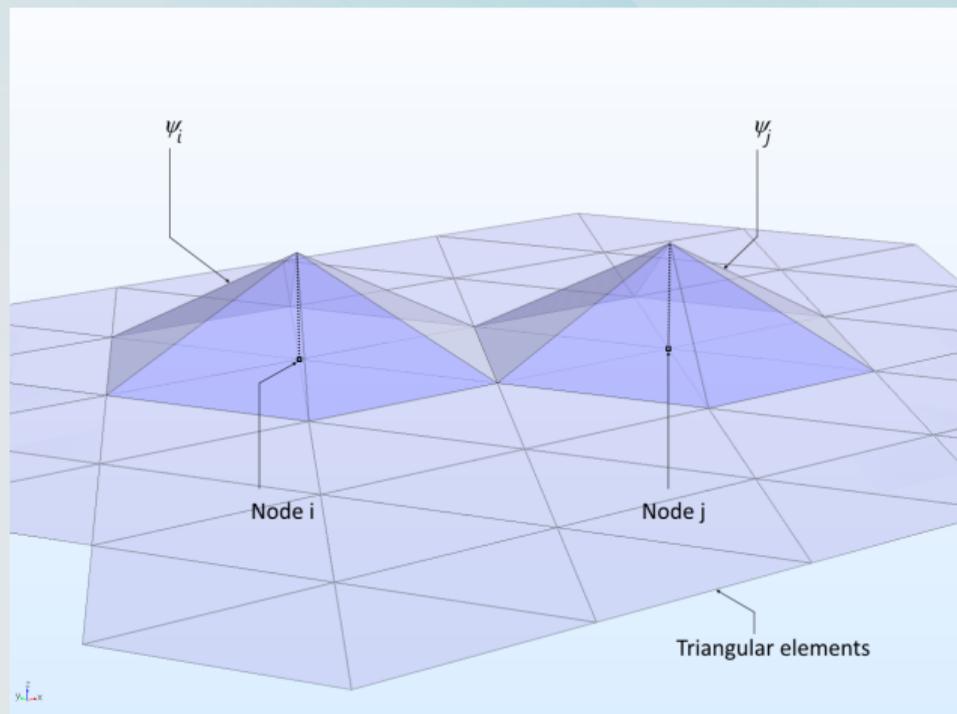
Recuperado: <https://pages.saclay.inria.fr/>

# Espacios de aproximación ( $U_h^k$ ) para funciones escalares



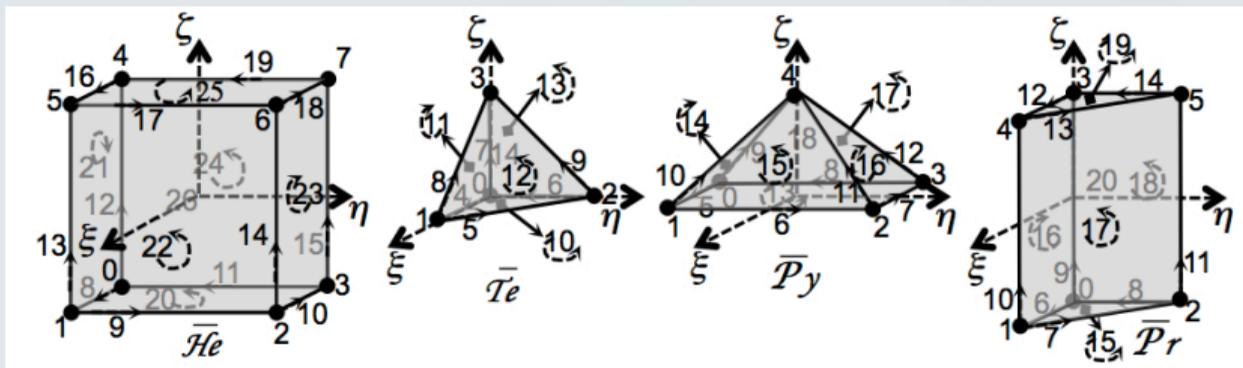
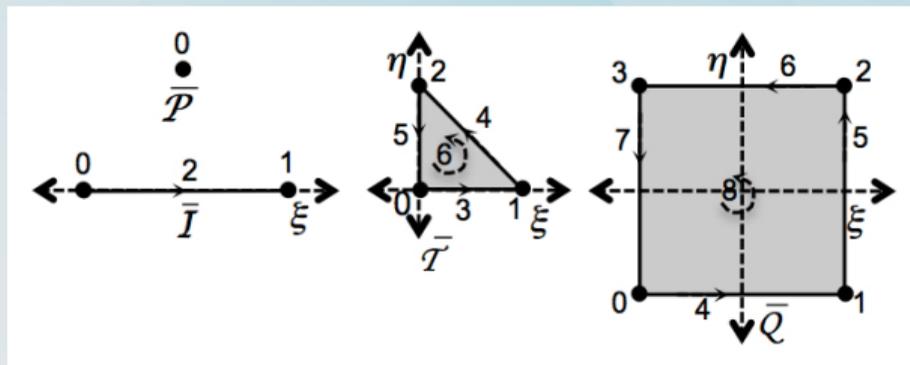
Fuente: DOI: 10.1002/nme.6248

## Bases para los espacios de aproximación $U_h^k$

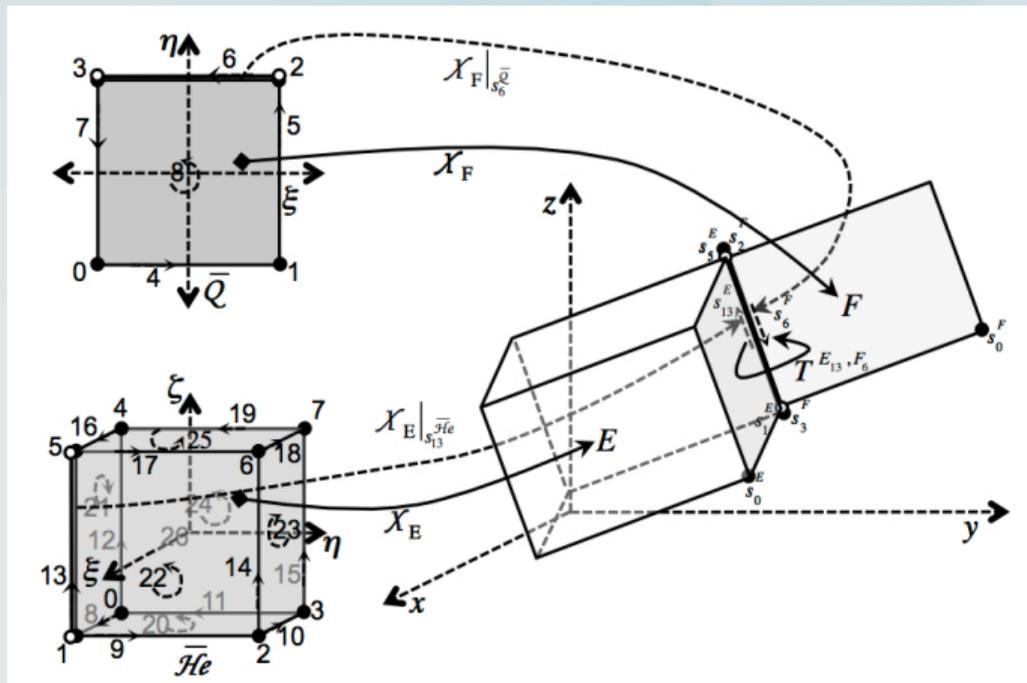


Recuperado: <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>

# Construcción de bases para $U_h^k$ : Elemento maestro



# Construcción de bases para $U_h^k$ : transformaciones geométricas



## Bases jerárquicas para espacios de aproximación escalar 1D, 2D y 3D

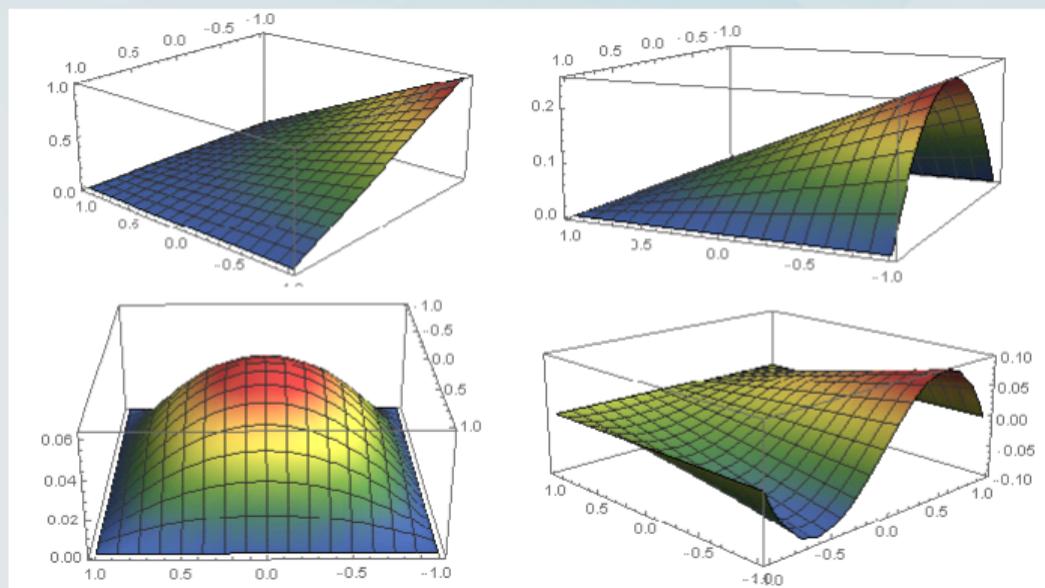
P. Devloo, C. Bravo, E. Rylo (2008)

- Bases jerárquicas LabMec vs base de Lagrange.
- Construcción a partir del elemento maestro.
- Funciones de forma asociados a los lados.
- Usa polinomios de Chebyshev.

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}^{\hat{a}0}(\xi, \eta) &= \frac{(1-\xi)(1-\eta)}{2} \cdot \hat{\varphi}^{\hat{a}1}(\xi, \eta) = \frac{(1+\xi)(1-\eta)}{2} \\ \hat{\varphi}^{\hat{a}2}(\xi, \eta) &= \frac{(1+\xi)(1+\eta)}{2} \cdot \hat{\varphi}^{\hat{a}3}(\xi, \eta) = \frac{(1-\xi)(1+\eta)}{2} \\ \hat{\varphi}^{l_0, n}(\xi, \eta) &= \hat{\varphi}^{\hat{a}0}(\xi, \eta)[\hat{\varphi}^{\hat{a}1}(\xi, \eta) + \hat{\varphi}^{\hat{a}2}(\xi, \eta)]f_n(\xi), \\ \hat{\varphi}^{l_1, n}(\xi, \eta) &= \hat{\varphi}^{\hat{a}1}(\xi, \eta)[\hat{\varphi}^{\hat{a}2}(\xi, \eta) + \hat{\varphi}^{\hat{a}3}(\xi, \eta)]f_n(\eta), \\ \hat{\varphi}^{l_2, n}(\xi, \eta) &= \hat{\varphi}^{\hat{a}2}(\xi, \eta)[\hat{\varphi}^{\hat{a}3}(\xi, \eta) + \hat{\varphi}^{\hat{a}0}(\xi, \eta)]f_n(-\xi), \\ \hat{\varphi}^{l_3, n}(\xi, \eta) &= \hat{\varphi}^{\hat{a}3}(\xi, \eta)[\hat{\varphi}^{\hat{a}0}(\xi, \eta) + \hat{\varphi}^{\hat{a}1}(\xi, \eta)]f_n(-\eta), \end{aligned}$$

# Bases locales jerárquicas para espacios de aproximación escalar $U_h^k$

P. Devloo, C. Bravo, E. Rylo (2008)



Funciones de forma para elemento maestro cuadrilátero

# Construcción de espacios de aproximación jerárquicos $V_h^k$ en $H(\text{div})$

D. Siqueira, P. Devloo, S. Gomes (2013)

$$\varphi^{l_0, a_0} = \varphi^{a_0} \vec{v}_0, \quad \varphi^{l_0, a_1} = \varphi^{a_1} \vec{v}_1, \quad \varphi^{l_0, n} = \varphi^{l_0, n} \vec{v}_2$$

$$\varphi^{l_1, a_1} = \varphi^{a_1} \vec{v}_3, \quad \varphi^{l_1, a_2} = \varphi^{a_2} \vec{v}_4, \quad \varphi^{l_1, n} = \varphi^{l_1, n} \vec{v}_5$$

$$\varphi^{l_2, a_2} = \varphi^{a_2} \vec{v}_6, \quad \varphi^{l_2, a_3} = \varphi^{a_3} \vec{v}_7, \quad \varphi^{l_2, n} = \varphi^{l_2, n} \vec{v}_8$$

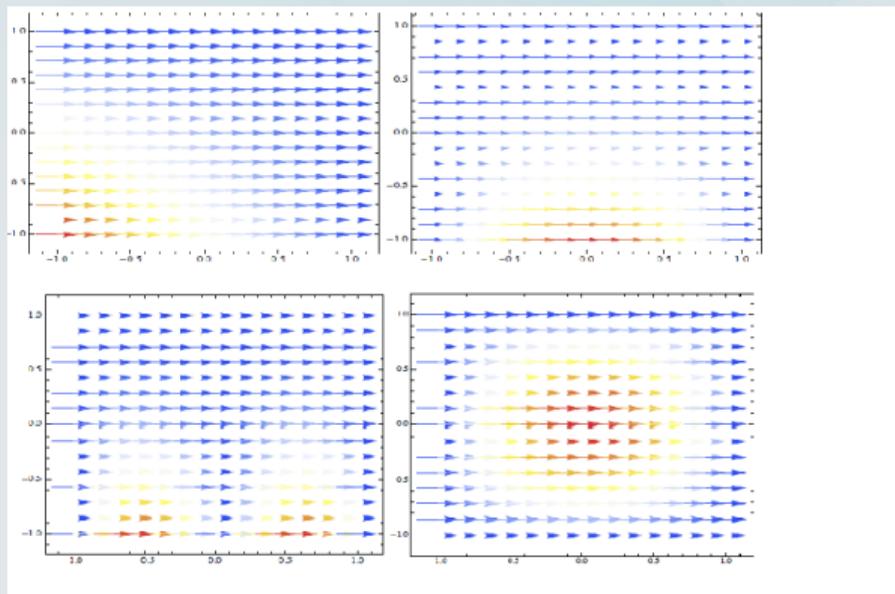
$$\varphi^{l_3, a_3} = \varphi^{a_3} \vec{v}_9, \quad \varphi^{l_3, a_0} = \varphi^{a_0} \vec{v}_{10}, \quad \varphi^{l_3, n} = \varphi^{l_3, n} \vec{v}_{11}$$

$$\varphi_1^{K, n_0, n_1} = \varphi^{K, n_0, n_1} \vec{v}_{16}, \quad \varphi_2^{K, n_0, n_1} = \varphi^{K, n_0, n_1} \vec{v}_{17}, \quad \text{e} \quad \varphi_3^{l_m, n} = \varphi^{l_m, n} \vec{v}_{m+12},$$

Base jerárquica de funciones vectoriales

# Construcción de espacios de aproximación ( $V_h^k$ ) en $H(div)$

D. Siqueira, P. Devloo, S. Gomes (2013)

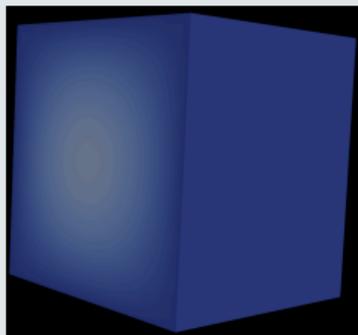


Base jerárquica de funciones vectoriales sobre el elemento maestro

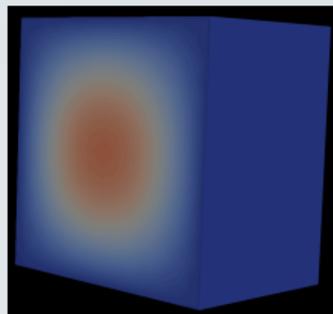
## Ecuación de difusión

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \mathbb{K} \nabla u = f & \text{sobre } \Omega \\ u = u_D & \text{en } \Gamma_D \\ -\mathbb{K} \nabla u \cdot \mathbf{n} = g & \text{en } \Gamma_N \end{cases}$$

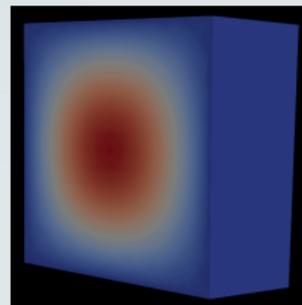
$\mathbb{K}$ : tensor de difusividad



Densidad ( $u$ )



Densidad ( $u$ )

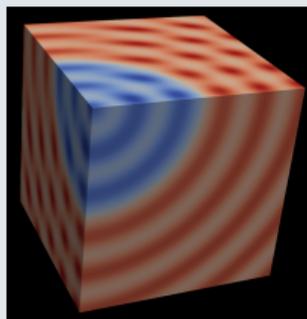


Densidad ( $u$ )

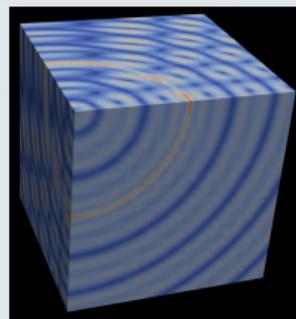
## Ley de Darcy (Flujo monofásico en medio poroso $\Omega$ )

$$\begin{cases} \sigma = -\mathbb{K}\nabla u & \text{sobre } \Omega \\ \nabla \cdot \sigma = f & \text{sobre } \Omega \\ u = u_D & \text{in } \Gamma_D \\ \sigma = g & \text{in } \Gamma_N \end{cases}$$

$\mathbb{K}$ : tensor de permeabilidad (uniformemente positivo definido)



Presión ( $u$ )



Magnitud del Flujo ( $\sigma$ )

# MEF clásico

Espacio de aproximación  $U_h^k$

Funciones continuas polinómicas por partes, de grado no mayor a  $k$ :

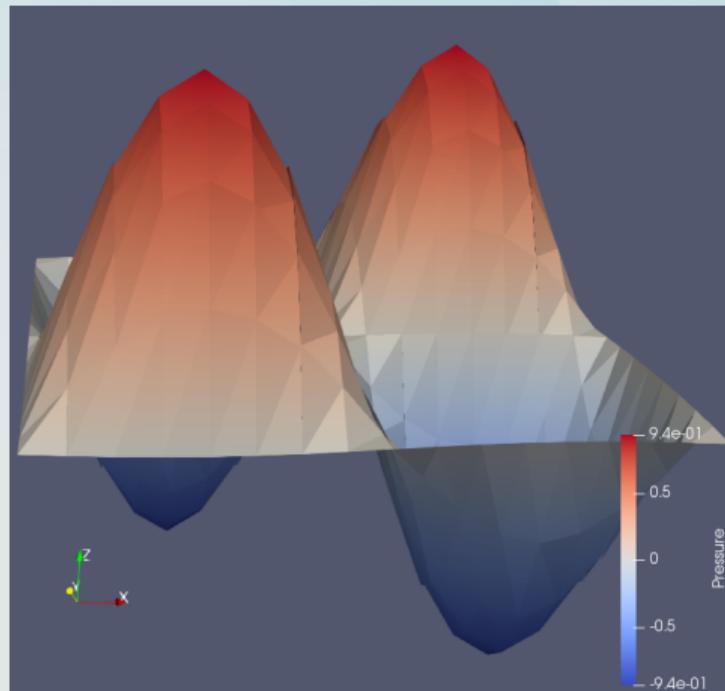
$$U_h^k \subset H^1(\Omega)$$

Forma débil discretizada de la ecuación de difusión

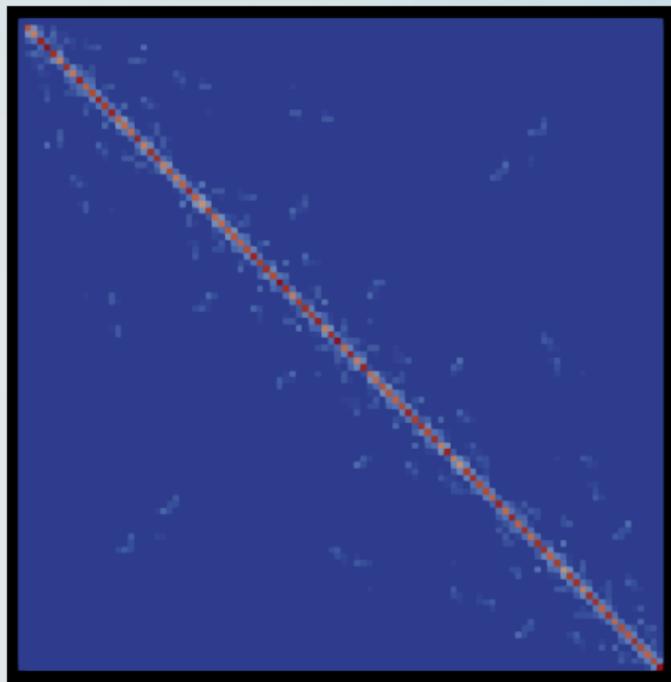
Hallar  $u_h \in U_h$  tal que  $u_h|_{\Gamma_D} = u_D$  y

$$\int_{\Omega} \mathbb{K} \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, d\Omega = \int_{\Omega} f v_h \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} g v_h \, ds, \quad \forall v_h \in U_h \cap H_D^1(\Omega)$$

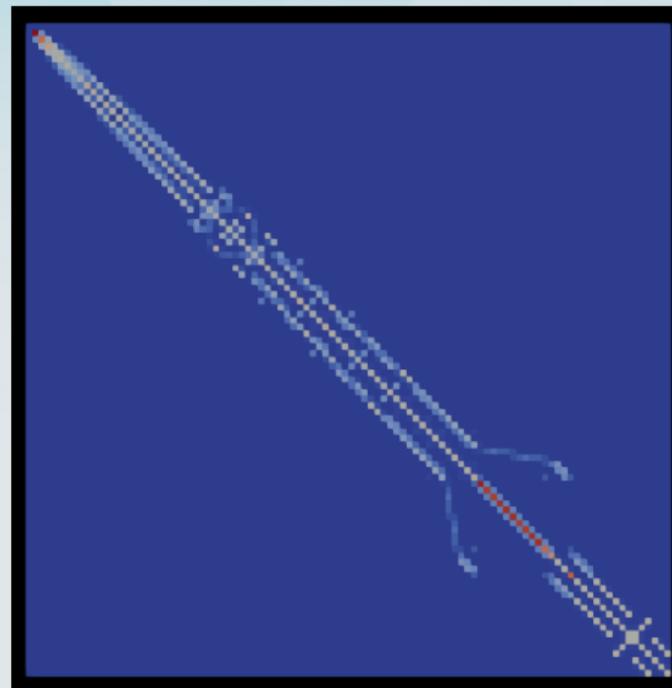
# Aproximación mediante MEF $H^1$ -conforme



## Matriz esparsa del MEF clásico para la ecuación de difusión



Sin optimización de banda



Con optimización de banda

## Formulación Galerkin discontinuo

Espacio de aproximación  $V_p(M_h) \subset L^2(\Omega)$

Funciones discontinuas polinómicas por partes.

Formulación débil discretizada para el problema de Poisson

Find  $u_h \in V_p(M_h)$  such that

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} \mathbb{K} \nabla u_h \cdot \nabla v_h d\Omega_e + \int_{\partial\Omega} (u_h \nabla v_h \cdot \mathbf{n} - v_h \mathbb{K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}) ds + \\ & + \int_{\Gamma_i} (\langle \nabla v_h \cdot \mathbf{n} \rangle [u_h] - \langle \mathbb{K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n} \rangle [v_h]) ds = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} f v_h d\Omega_e \end{aligned}$$

$\forall v_h \in V_p(M_h)$ .  $\Gamma_i$  es la unión de las interfaces.

## Formulación mixta (Método de elementos finitos mixto)

Par de espacios de aproximación balanceados

- $V_h \subset H(\text{div}, \Omega)$
- $U_h \subset L^2(\Omega)$

Discretized weak formulation

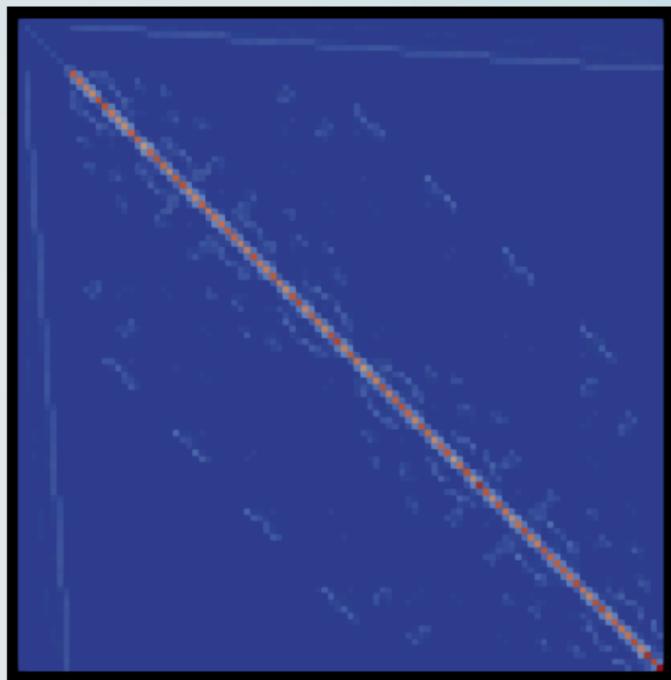
Find  $(\sigma_h, u_h) \in V_h \times U_h$  such that

$$\int_{\Omega} \sigma_h \cdot v_h \, dx + \int_{\Omega} u_h \nabla \cdot v_h \, dx = \int_{\Gamma} g v_h \cdot \eta \, ds, \quad \forall v_h \in V_h$$

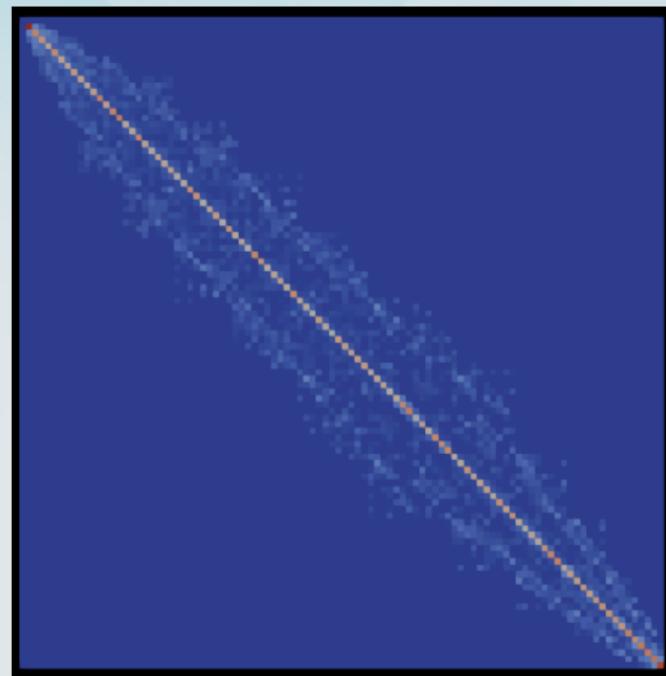
$$\int_{\Omega} w_h \nabla \cdot \sigma_h \, dx = \int_{\Omega} f w_h \, dx, \quad \forall w_h \in U_h$$

where  $\eta$  is the normal field to  $\Gamma$ , unitary and pointing outward.

## Matriz esparsa del MEF mixto aplicado a la ecuación de Darcy



Sin optimización de banda



Con optimización de banda

## Método de elementos finitos mixto enriquecido

A. Farias - P. Devloo - S. Gomes - D. Siqueira - D. Castro (2017)

$$\hat{V}_k^{1+} = \hat{V}_k^\partial \oplus \hat{V}_{k+1}^{\circ} \text{ and } \hat{U}_k^{1+} = \nabla \cdot \hat{V}_k^{1+}$$

P. Devloo - S. Gomes - T. Quinelato - S. Tian (2020)

$$\hat{V}_k^{n+} = \hat{V}_k^\partial \oplus \hat{V}_{k+n}^{\circ} \text{ and } \hat{U}_k^{n+} = \nabla \cdot \hat{V}_k^{n+}$$

## Método de elementos finitos híbrido primal

Par de espacios de aproximación

- $Y_h \subset L^2(\mathcal{E}_h)$
- $U_h \subset L^2(\Omega)$

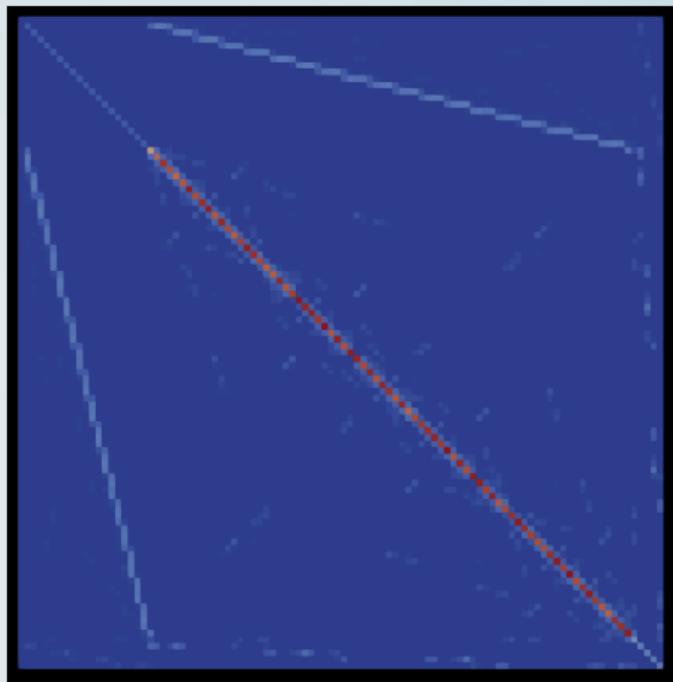
Discretized weak formulation

Hallar  $(\lambda_h, u_h) \in M(\mathcal{E}_h) \times U_h$  tal que

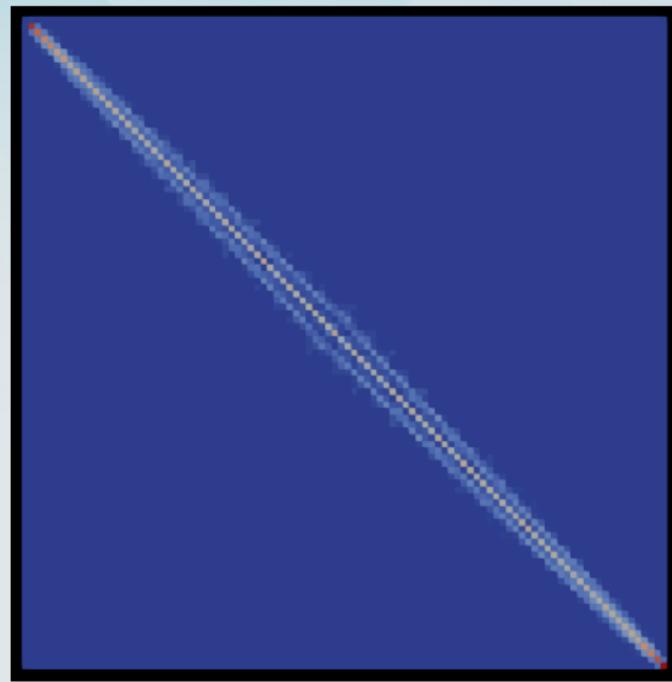
$$\sum_e \int_{\Omega_e} \mathbb{K} \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, d\Omega_e + \sum_e \int_{\partial\Omega_e} \lambda_h v_h \, ds = \sum_e \int_{\Omega_e} f v_h \, d\Omega_e \quad \forall v_h \in U_h$$

$$\sum_e \int_{\partial\Omega_e} \mu_h u_h \, ds = \sum_e \int_{\partial\Omega_e \cap \partial\Omega_D} \mu_h u_D \, ds, \quad \forall \mu_h \in M_h$$

## Matriz esparsa del MEF híbrido primal



Sin optimización de banda



Con optimización de banda

## Convergencia y aceleración de la convergencia

### Refinamiento uniforme (h-refinamiento)

Estimadores de error a priori:

$$\|u - u_h\| \leq Ch^k$$

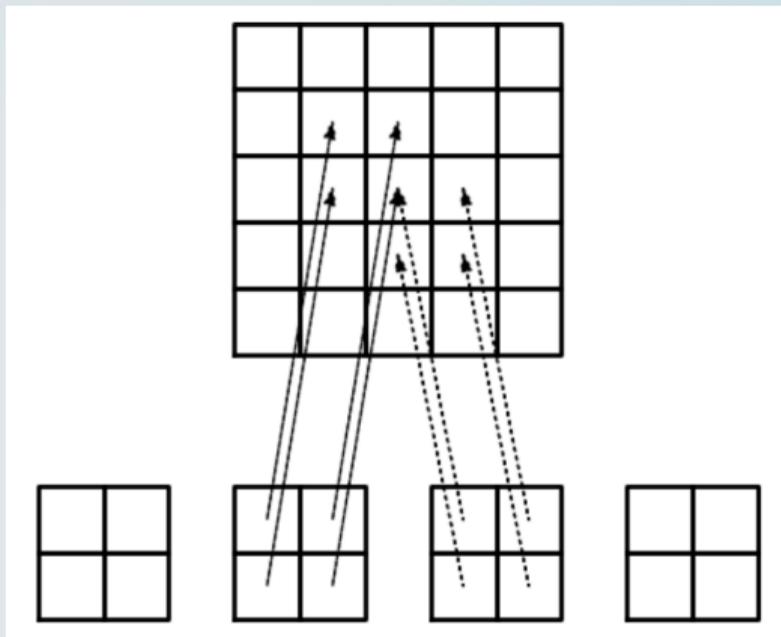
### Refinamiento adaptativo (hp-refinamiento)

Estimadores de error a posteriori:

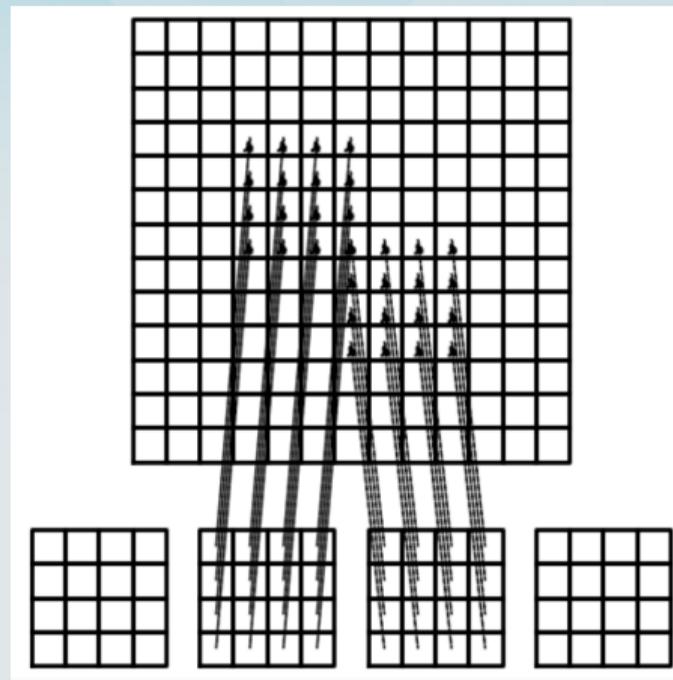
$$\|u - u_h\| \leq \left( \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta_K^2 \right)^{1/2}$$

donde  $\eta_K = \eta_K(u_h)$

# Ensamblaje de la Matriz FEM con enumeración regular

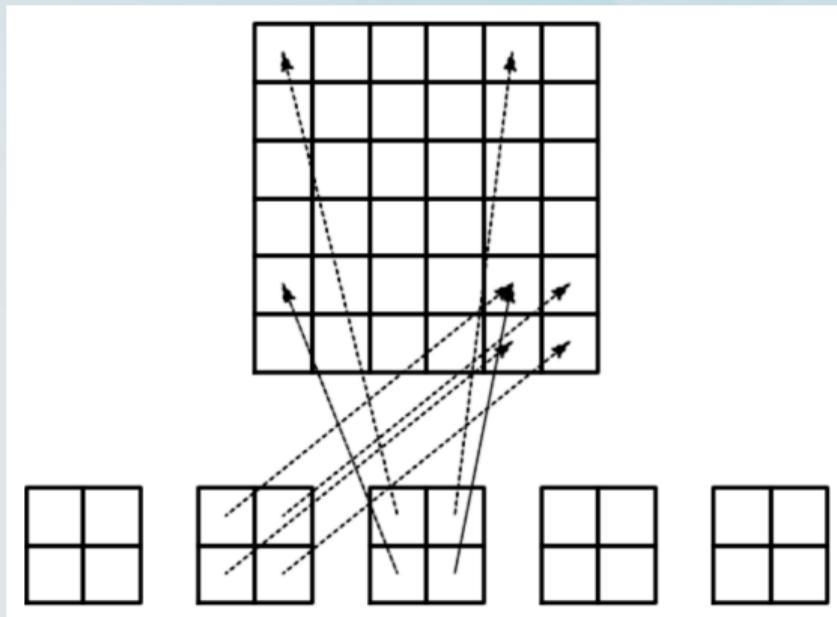


FEM con orden polinomial bajo



FEM con orden polinomial superior

## Ensamblaje de la Matriz MEF con enumeración irregular



Ensamblaje de una matriz MEF esparsa

# Paradigmas de Computación Paralela

## Threading Building Blocks - TBB

- Librería de plantillas C++ desarrollado por Intel.
- Paradigma basado en tareas.

## Open Multi-Processing - OpenMP

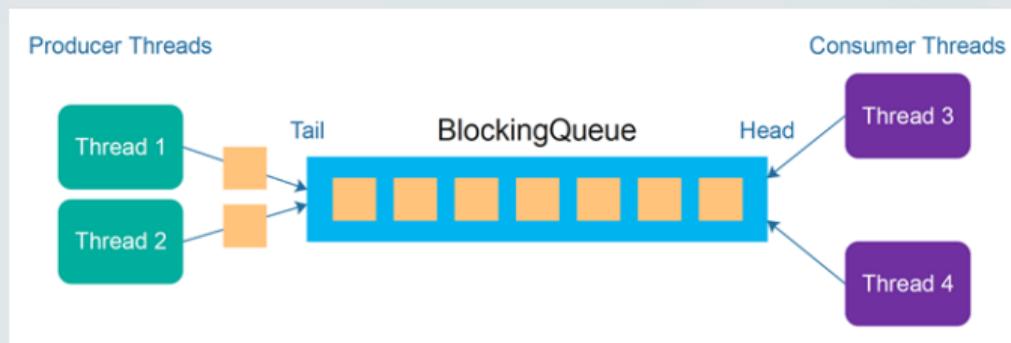
- Interface de programación paralela en C++ (hilos de procesamiento)
- Un hilo (master thread) se encarga de distribuir el trabajo a otros hilos.

## Parallel STL de C++17

- Conjunto de Plantillas y herramientas para paralelización
- Flexible

## Algoritmo de paralelización: Productor - Consumidor

- Nucleos de procesamiento que construyen matrices locales con cuadratura de Gauss.
- Nucleos de procesamiento que insertan las matrices locales en la matriz global.



Recuperado: <https://jenkov.com/tutorials>



## Algoritmo de paralelización para el ensamblaje: Coloración de grafos

9	10	11	12
5	6	7	8
1	2	3	4

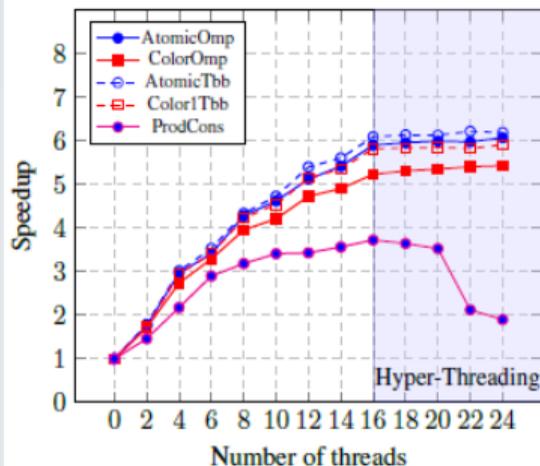
Malla sin colorear

1	2	5	6
3	4	3	4
1	2	1	2

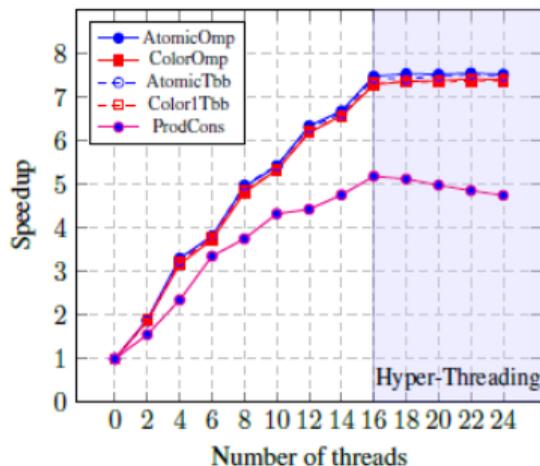
Malla coloreada para 6 procesadores

# Speedups del ensamblaje de la matriz esparsa - 2D

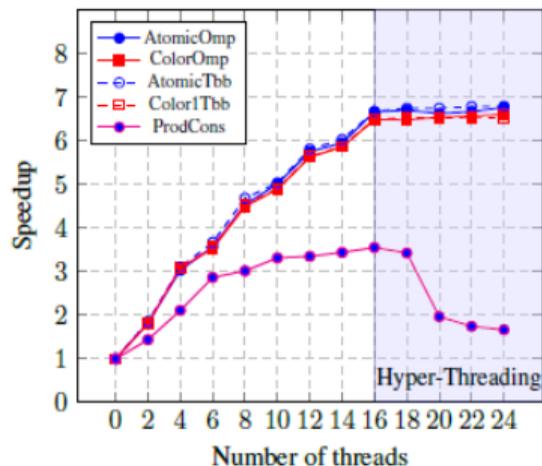
Primal Hybrid, Quadrilateral elem.



Enriched mixed, Quadrilateral elem.

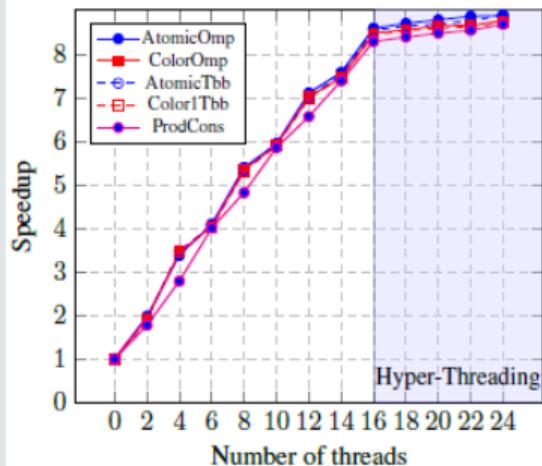


Non-enriched mixed, Quadrilateral elem.

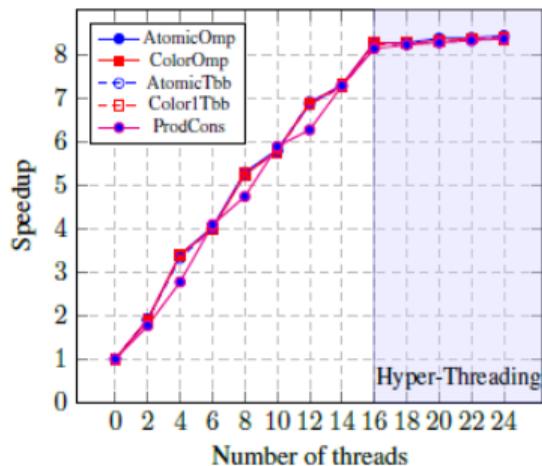


# Speedups del ensamblaje de la matriz esparsa - 3D

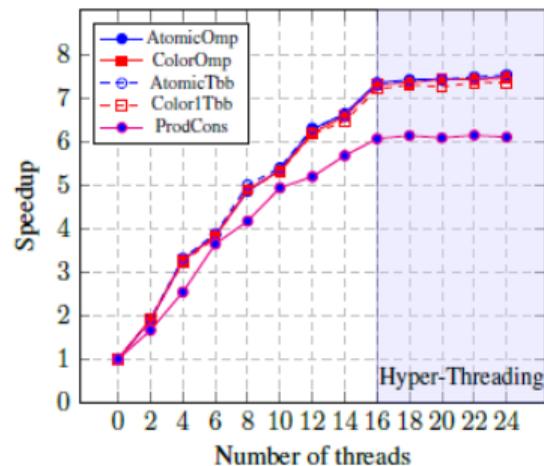
Primal Hybrid, Hexahedral elem.



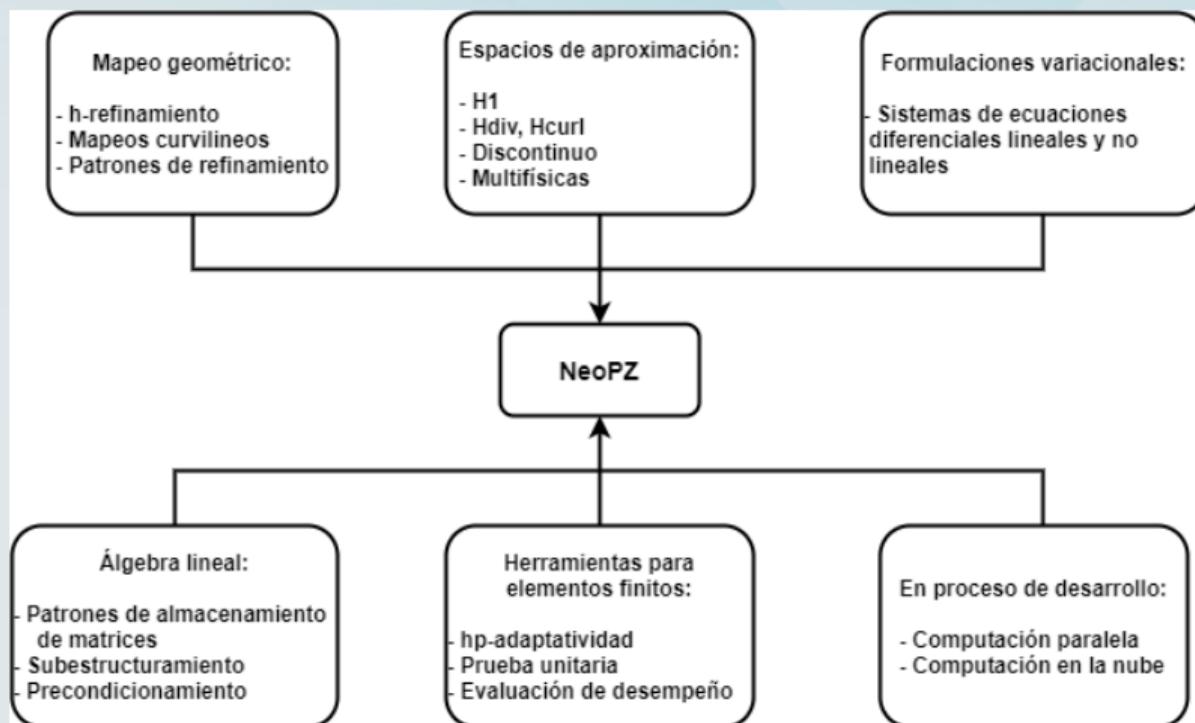
Enriched mixed, Hexahedral elem.



Non-enriched mixed, Hexahedral elem.



# Ambiente de computación científica NeoPZ (LABMEC - UNICAMP)



## Agradecimientos

- Prof. Philippe Devloo y equipo LabMec
- Ing. Mg. Victor Bringhenti Oliari
- UNSA-investiga
- Oficina Universitaria de Informatica y Sistemas - UNSA
- Prof. Jorge Lizardo Díaz Calle - USP (Asesor externo)
- Equipo del Proyecto de Investigación: Prof. Fermín Mamami, Prof. Roger Mestas, Prof. Eliseo Velasquez, Bach. José Ayñayanque, Bach. Rómulo Condori.
- Departamento Académico de Matemáticas

## References

-  Franco Brezzi and Michel Fortin, *Mixed and hybrid finite element methods*, vol. 15, Springer Science & Business Media, 2012.
-  Matthias Bollhöfer, Olaf Schenk, Radim Janalik, Steve Hamm, and Kiran Gullapalli, *State-of-the-art sparse direct solvers*, Parallel Algorithms in Computational Science and Engineering, Springer, 2020, pp. 3–33.
-  Philippe RB Devloo, Sônia M Gomes, Thiago O Quinelato, and Shudan Tian, *Enriched two dimensional mixed finite element models for linear elasticity with weak stress symmetry*, Computers & Mathematics with Applications **79** (2020), no. 9, 2678–2700.
-  Michael Voss, Rafael Asenjo, and James Reinders, *Pro tbb: C++ parallel programming with threading building blocks*, Apress, 2019.