



“Terão os nubentes **FEA** e **HPC**
uma vida longa e feliz (na UMinho)?”

Exemplos **FEA** e desafios **HPC**



Luís Alves

Departamento de Engenharia Mecânica
Escola de Engenharia
Universidade do Minho
16 de Outubro de 2012



Desafios de HPC + FEA:

DD3IMP – para a simulação dos processos
de **estampagem** de chapas metálicas

V-Biomech – para a simulação
de problemas de **biomecânica**

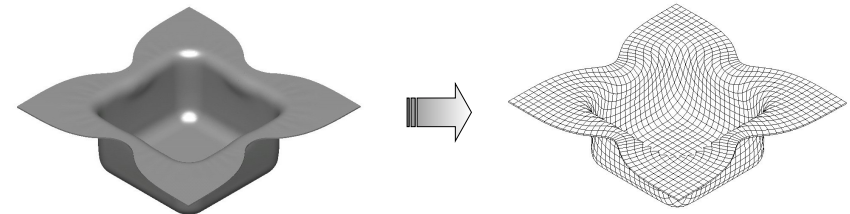


Tópicos

- ✓ Tópicos sobre FEA
 - Integração Espacial (*os Elementos Finitos*)
 - Integração Temporal
 - Problemas Eulerianos *versus* Lagrangeanos
 - Malhas Estruturadas *versus* Não-Estruturadas
 - Problemas Dinâmicos *versus* Estáticos
 - Integração Explícita *versus* Implícita
- ✓ Desafios/dificuldades da paralelização
 - FE, DDM, *contacto*, *solver de equações*,...
 - ...
- ✓ Exemplos FEA
 - Na indústria mecânica: DD3IMP
 - Na biomecânica: V-Biomech



Integração espacial



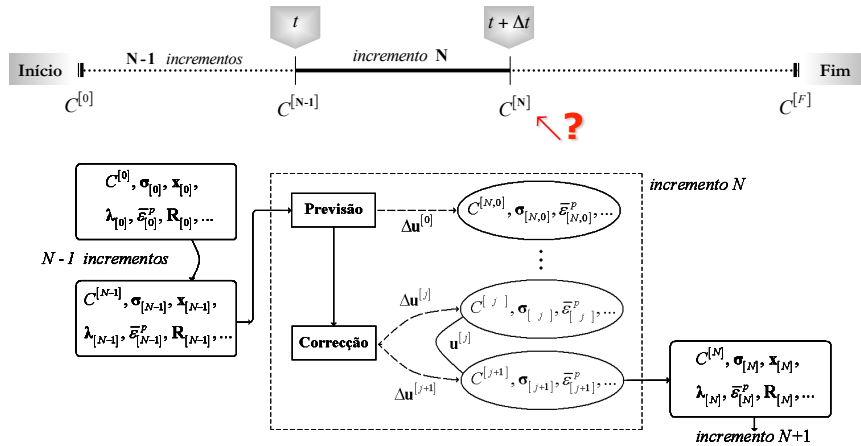
$$\int_{\Omega} \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\Omega = \sum_{ie=1}^{ne} \left[\int_{\Omega_{ie}} \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\Omega_{ie} \right]$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\Omega = \sum_{ie=1}^{ne} \left[\int_{\Omega_{ie}} \mathbf{F}(\xi) |J_{ie}(\xi)| d\xi d\eta d\zeta \right]$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\Omega = \sum_{ie=1}^{ne} \left\{ \sum_{g=1}^{ng} \left[w_{ie}^g \mathbf{F}(\xi_g) |J_{ie}(\xi_g)| \right] \right\}$$

**Método dos
Elementos
Finitos**

Integração temporal



Classificação códigos FEA

Problemas Eulerianos versus Lagrangeanos

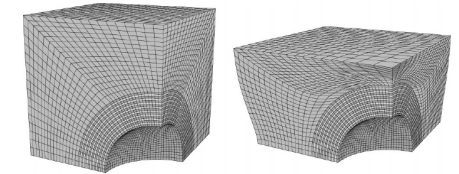
EULERIANOS – a posição espacial importa!!!

Ex.: Escoamentos / fundição / artérias...
Previsão meteorológica

LAGRANGEANOS – o ponto material importa!!!

Ex.: Sólidos e estruturas

*E do ponto de vista do HPC?
Qual o mais fácil de abordar?*

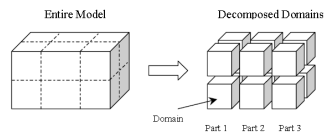


Classificação códigos FEA

Malhas Estruturadas versus Não-Estruturadas

Definição!

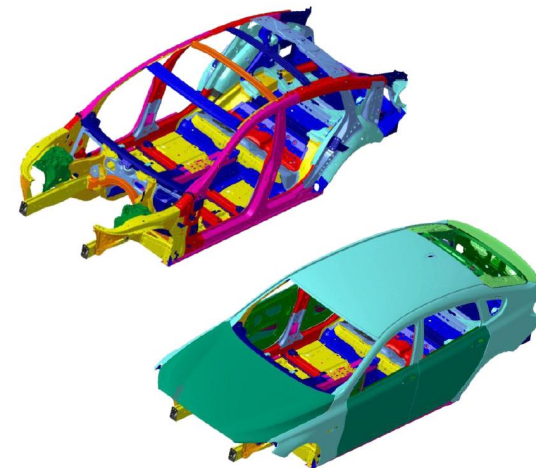
Faz toda a diferença na perspectiva do HPC. Porquê?



Exemplos:

- Previsão meteorológica
- Escoamento do sangue nas artérias
- Crash-test Automóvel
- Conformação de Chapa

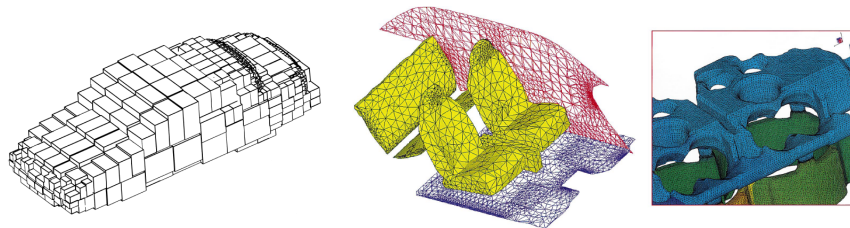
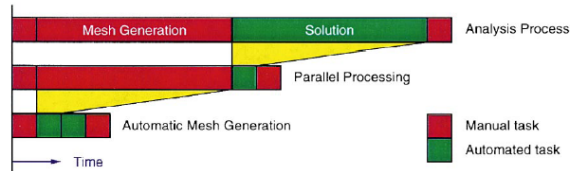
A geração de Malha e HPC



- Steel**
 - DC04
 - DX54D
 - DX56D
 - HC180BD, HC180YD
 - HC220BD, HC220YD
 - HC260BD, HC260LAD, HC260X(D)
 - HC300BD, HC300LAD, HC300X
 - HC340LAD, HC340X(D)
 - HC380LAD
 - HC400T
 - HC420LAD, HC450X
 - HC600C, HD680C
 - HC700X
 - HC1000W(+TE), HC1000WD+ZF
- Aluminium**
 - AlMg3.5Mn
 - AlMg4.5Mn0.4
 - AlMg1/AlMg5.7/AlMg1
 - AlMg0.4Si1.2
 - AlSi0.6Mg0.5
 - AlSi10MgMnFe
 - AlMgSi
- Others**
 - Other metallic materials

A geração de Malha e HPC

Geração da Malha e HPC...



Tópicos

- ✓ Tópicos sobre FEA
 - Integração Espacial (*os Elementos Finitos*)
 - Integração Temporal
 - Problemas Eulerianos *versus* Lagrangeanos
 - Malhas Estruturadas *versus* Não-Estruturadas
 - Problemas Dinâmicos *versus* Estáticos
 - Integração Explícita *versus* Implícita
- ✓ Desafios/dificuldades da paralelização
 - FE, DDM, *contacto*, *solver de equações*,...
 - ...
- ✓ Exemplos FEA
 - Na indústria mecânica: DD3IMP
 - Na biomecânica: V-Biomech

Classificação códigos FEA

Formulação para um ponto material

Quais as forças envolvidas?

Estáticas

Dinâmicas

São formuladas as equações de equilíbrio?

▪ Dinâmico *versus* Está

▪ Explícito *versus* Implí

| Formulação e Método de integração | | Programas |
|-----------------------------------|-----------|--|
| Estático | Implícito | ABAQUS/Standard, AUTOFORM, DD3IMP, DIEKA, INDEED, SHEET-3, AutoFORM |
| | Explícito | ITAS3D |
| Dinâmico | Implícito | |
| | Explícito | ABAQUS/Explicit, LS-Dyna3D, PAM-STAMP, OPTRIS, RADIOSS, STAMPACK, S3BS |
| Método Inverso | | AutoForm One-Step, FastForm3D, HyperForm, IsoPunch, Simex |

Desafios/problemas HPC

DDM - Domain Decomposition Method

Geração de Malhas de EF

Remalhagem/ Remapeamento

Contacto

Cálculo Multi-Escala

Otimização

Tarefas paralelas

Desafios HPC

Paradigmas:

- Memória partilhada* - fácil (será a opção certa?)
- Memória distribuída* - muito difícil (excepto dinâmico-explícitos)

Problemas/ dificuldades “Memória Partilhada”:

- Escalabilidade limitada pelo hardware*
- Não aplicável a clusters de cálculo/ Grid Computing*

Problemas/ dificuldades “Memória Distribuída”:

- Algoritmos Implícitos*
- Contacto entre domínios*
- Solver de equações lineares*

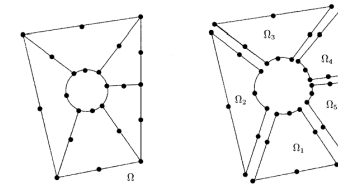
E as Tarefas “Paralelas” ?????

DDM

Domain Decomposition Method

Decomposição do Domínio Global em Sub-Domínios

- Equilíbrio dos Sub-Domínios em função da performance de cada nó*
- Minimização do fluxo de dados entre processos*



Novos Problemas: Como encontrar o novo equilíbrio global?

E o contacto entre domínios?

Compatibilidade entre numeração das malhas

DDM

DDM, remeshing e repartitioning:

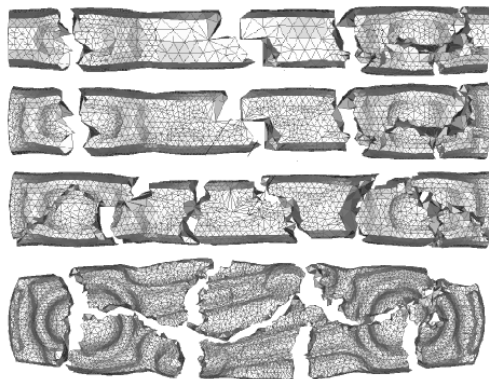
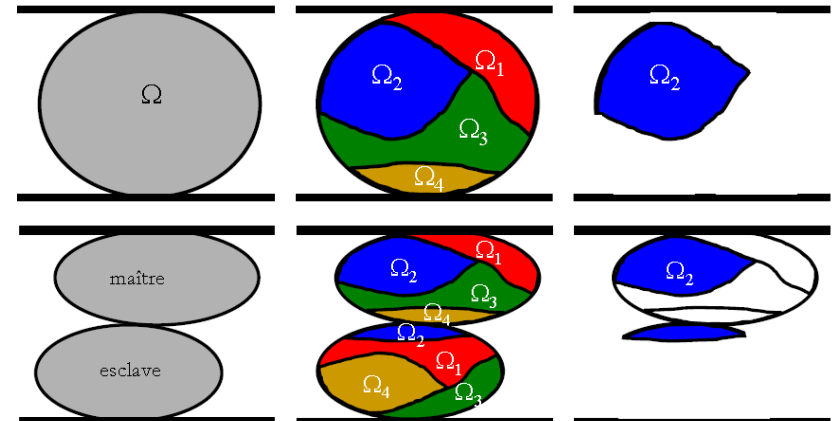


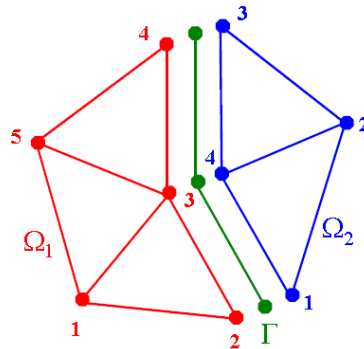
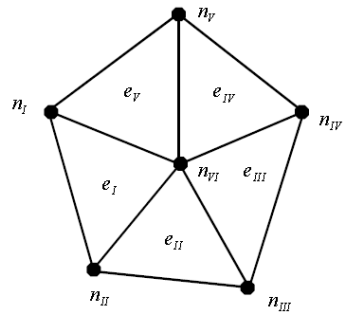
Fig. 2. Parallel remeshing for large deformation by combining local remeshing an repartitioning.

DDM e Contacto

DDM



Compatibilidade



Tópicos

- ✓ Tópicos sobre FEA
 - Integração Espacial (*os Elementos Finitos*)
 - Integração Temporal
 - Problemas Eulerianos *versus* Lagrangeanos
 - Malhas Estruturadas *versus* Não-Estruturadas
 - Problemas Dinâmicos *versus* Estáticos
 - Integração Explícita *versus* Implícita
- ✓ Desafios/dificuldades da paralelização
 - FE, DDM, contacto, solver de equações, ...)
 - ...
- ✓ Exemplos FEA
 - Na indústria mecânica: DD3IMP
 - Na biomecânica: V-Biomech

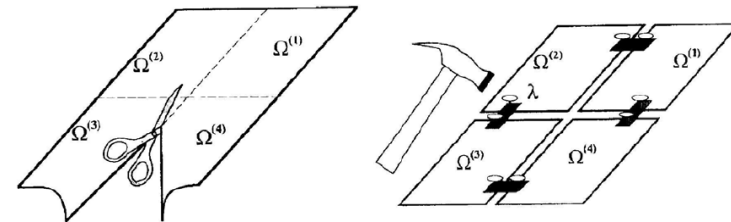
DDM

Como encontrar o novo equilíbrio global?

formulação DINÂMICA EXPLÍCITA:
outras formulações:

simples
+++ complicado

- resolução ao nível de cada sub-domínio
- resolução ao nível da fronteira (método **FETI**, ...)



DD3IMP

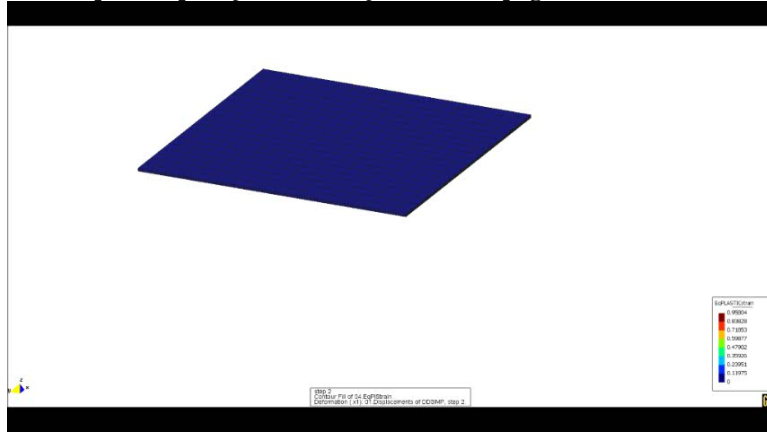
✓ Objectivos/desafios na indústria:

- ✓ Acelerar a introdução de novos produtos no mercado;
- ✓ Crescente complexidade geométrica dos produtos/componentes;
- ✓ Introdução de materiais novos e muito mais complexos;
- ✓ Redução dos custos de projecto e fabrico;
- ✓ Redução das emissões de gases poluentes;
- ✓ Optimização de processos e procedimentos tecnológicos;
- ✓ Aumento da segurança e da qualidade.

A simulação numérica dos processos de conformação de chapa é, hoje, uma ferramenta absolutamente fundamental.



✓ Exemplo de aplicação à simulação da estampagem de uma caixa:



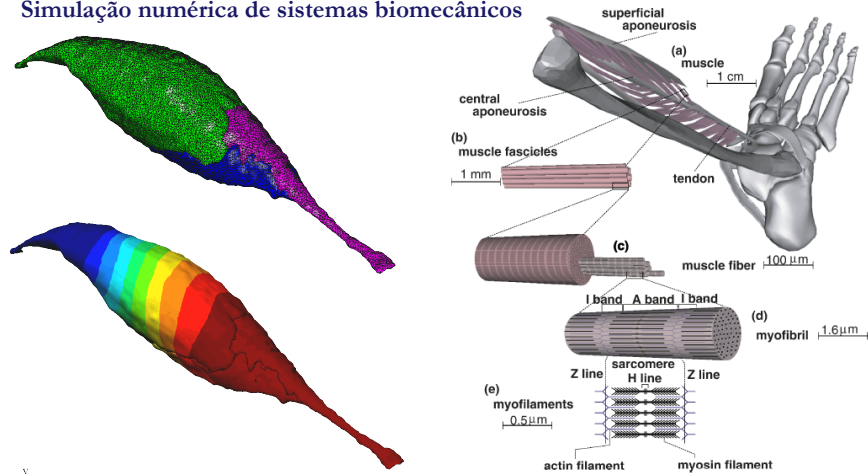
✓ Exemplo de código Fortran com paralelização OpenMP:

```

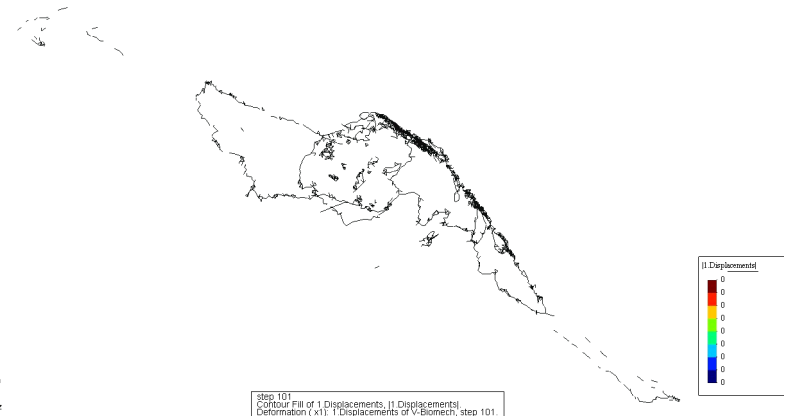
...
!$OMP PARALLEL
!$OMP PRIVATE(NEL,MC,NI,NPINT,ITYPE,IMAT)
!$OMP PRIVATE(XL,DUL,IDL,IDL2)
!$OMP PRIVATE(ESM,ENF,ESM2,ENF2)
!$OMP DO
DO IE=1,NEDEF
C
C      NEL=NNODE(IE)
C      Initialize to zero the elemental stiffness matrix and
C      nodal forces
ESM(1:9,NEL,NEL)=0.DO
ENF(1:3,1:NEL)=0.DO
C
C      Localize the global arrays X, XTOR, DU and ID as well the
C      elemental pointers and variables NEL, MC, NI, NPINT, ITYPE and IMAT for the element IE
CALL LOCALI(IE,NEL,XL,DUL,IDL,IDL2,MC,NI,NPINT,ITYPE,IMAT)
C
C      Actualize the state variables, compute the elemental stiffness matrix and the elemental nodal forces
CALL ELEMCO(ITYPE,XL,DUL,IMAT,NEL,NI,NPINT,XNEDEF(1,ie),ESM,ENF)
C
!$OMP CRITICAL
C      Calculate diagonal terms of the stiffness matrix
!CALL CALDIA(MC,MCON,ESM,NEL,DUR)
C      Correct ESM and ENF arrays due to contact nodes
CALL ESMCOR(ESM,ENF,ESM2,ENF2,IDL,MC,NEL,NCGV(1,1),CGV)
C      Add the contribution of the elemental nodal forces to the
C      right-hand sides of the reduced system and the equations of
C      the lagrange multipliers of the stick nodes and to the global nodal forces (reactions)
CALL FORMGF(ENF,IDL,IDL2,NEL,MC,CGV,ENF2,ESM)
C      Add the contribution of the elemental stiffness matrix to the global stiffness matrix
CALL FORMGS(NEL,MC,ESM,ESM2,IDL,IDL2,CGV)
C
!$OMP END CRITICAL
ENDDO
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
...

```

Simulação numérica de sistemas biomecânicos



Exemplo simulação da contracção de um músculo da perna:



V-Biomech

Estratégias de Otimização/Paralelização:

Ciclos elementares

Solver Solver Equações

Intel MKL

PARADISO

...

Determinação do contacto

Partição do domínio (!?)

```
!$OMP PARALLEL
...
!$OMP PRIVATE (NEL,MC,NI,NPINF,ITYPE,MAT)
!$OMP PRIVATE (XL,DUL,IDL,IDL2)
!$OMP PRIVATE (ESM,ENF,ESM2,ENF2)
!$OMP DO
  DO IE=1,NEDEF
    ... Calculus of the Elemental Stiffness Matrix
!$OMP CRITICAL
    ... Add to Global Stiffness Matrix
!$OMP END CRITICAL
  ENDDO
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
...
```

V-Biomech Futuro

DDM:

Cálculo de sistemas biomecânicos com grandes modelos

OPTIMIZAÇÃO:

Identificação in-vivo das propriedades mecânicas de bio-tecidos

Desenvolvimento de próteses "patient-tailored"

Sistemas Online:

Ferramental numérico de apoio a intervenções médicas

Hybrid Dummies:

Combinação de técnicas multicorpo + FEA + dummies

Visualização

Mesh generation system from CT/MR slice images

✓ Introduction of VCAD technologies 