

# Uma Construção Tridimensional e Implementação Paralela FORTRAN-MPI de um Método Lagrangiano-Euleriano Totalmente Discreto para Leis de Conservação Hiperbólicas

Eduardo Abreu<sup>1</sup>, Pedro Godoi<sup>2</sup>  
UNICAMP/IMECC-DMA, Campinas, SP

**Resumo.** Neste trabalho é apresentado um método Lagrangiano Euleriano para leis de conservação hiperbólica para domínios espaciais de três dimensões, baseado no conceito das *no-flow curves* [1, 2]. Uma primeira validação do método é realizada por meio da comparação de um recorte dos resultados obtidos no domínio tridimensional com um caso unidimensional compatível, verificando que o comportamento da solução numérica corresponde qualitativamente à solução dos problemas propostos. Além disso, a escalabilidade do método para resolução utilizando vários processadores (*cores*) é avaliada por meio de uma implementação paralela utilizando FORTRAN-MPI, verificando a medida de *speedup* relativo do código, indicando boa escalabilidade do método.

**Palavras-chave.** Leis de conservação hiperbólica em 3D, Método Lagrangiano-Euleriano Totalmente Discreto, Curvas Tridimensionais No-Flow, Implementação paralela Fortran-MPI

## 1 Introdução

Neste trabalho considera-se o problema de aproximar resultados para leis de conservação hiperbólicas em domínios tridimensionais, utilizando discretizações do domínio espacial em cubos ou tetraedros. O modelo de lei de conservação hiperbólico [1, 2, 5],

$$\begin{cases} u_t(t, \mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{f}(u(t, \mathbf{x})) = 0, & (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}_+ \times \Omega, \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \\ u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega \end{cases}, \quad (1)$$

com  $u : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$ ,  $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{m \times d}$ ,  $\mathbf{f} \in C^1(\Omega)$  e  $u_0 \in L^\infty(\Omega)$ , pode ser encontrado numa série de problemas de engenharia e física, nos quais a grandeza estudada se desloca por meio de advecção ou convecção [3].

Utilizando o *framework* Lagrangiano-Euleriano e o conceito de *no-flow curves*, introduzido em [2], um novo esquema totalmente discreto é apresentado para domínios tridimensionais utilizando malhas de cubos (ou paralelepípedos) e tetraedros, estendendo as formulações já apresentadas para malhas triangulares [1].

## 2 Método Lagrangiano-Euleriano 3D Totalmente Discreto

Consideremos uma discretização do domínio  $\Omega \in \mathbb{R}^3$  em elementos cúbicos ou tetraédricos. Para cada elemento  $K$ , denotamos por  $|K|$  o volume do elemento (cubo ou tetraedro),  $N(K)$  o

<sup>1</sup>eabreu@unicamp.br

<sup>2</sup>p215956@dac.unicamp.br

conjunto de seus vizinhos e, para cada  $L \in N(K)$ ,  $|K|L|$  a área da interface entre os elementos  $K$  e  $L$  e  $\mathbf{n}_{KL}$  o vetor normal à interface entre os elementos, apontando de  $K$  para  $L$ .

Para construção do Método Lagrangiano-Euleriano 3D Totalmente Discreto, tanto em malhas de cubos como em malhas de tetraedros, seguindo o mesmo processo utilizado em [1] e detalhado em [6], obtemos assim uma extensão para uma nova formulação 3D

$$u_K^{n+1} = u_K^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_{L \in N(K)} F(u_K^n, u_L^n, n_{K|L}) |K|L|, \quad (2)$$

com

$$F(u_K^n, u_L^n, n_{KL}) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{f}(u_K^n) + \mathbf{f}(u_L^n) \right) \cdot \mathbf{n}_{KL} + \sup_{u, K, L} \left| \frac{\mathbf{f}(u)}{u} \cdot \mathbf{n}_{KL} \right| (u_K^n - u_L^n). \quad (3)$$

Note que, enquanto o esquema obtido, a equação (2), assemelha-se a um esquema numérico típico para leis de conservação, o fluxo numérico proveniente da formulação Lagrangiana-Euleriana, equação (3), apresenta uma inovação: o uso das *no-flow curves*, representadas pelas quantias  $\frac{\mathbf{f}(u)}{u}$ , as quais, no contexto do *framework* Lagrangiano-Euleriano, conforme [2], tem-se  $\frac{\Delta x}{\Delta t} \propto O\left(\frac{\mathbf{f}(u)}{u}\right)$  providenciando naturalmente um possível coeficiente anti-difusivo para o esquema (mais detalhadamente explorado em [1, 2]).

### 3 Comparação Com o Caso 1D

Conforme [1, 2], o método Lagrangiano-Euleriano apresenta uma boa aproximação para uma variedade de casos e condições iniciais, incluindo sistemas de equações hiperbólicas. Como primeiro *benchmark* para o método apresentado, dois modelos de equações hiperbólicas clássicas foram escolhidas de maneira a abordar casos com diferentes propriedades na função de fluxo. A Equação de Advecção Linear, que apresenta uma função de fluxo linear, e a Equação de Burgers, que possui uma função de fluxo de envelope convexo (para detalhes, ver [3, 5]).

Uma vez que os resultados em 3D são de difícil visualização, será realizada uma comparação com a solução da equação no caso unidimensional (ver configuração na Figura 1(b) e (c)), de modo a promover uma análise qualitativa do comportamento da solução dentro do domínio 3D.

Para tal propósito, deve-se notar que, tomando uma linha dentro do domínio 3D que esteja alinhada à direção da função de fluxo, o comportamento da solução 3D nessa linha é comparável à solução de um problema 1D num domínio compatível.

Nessa comparação, o fluxo será tomado com mesma intensidade em cada eixo, e a linha do domínio utilizada será a diagonal principal do domínio, isto é, os pontos onde  $x_1 = x_2 = x_3$ , como ilustrado na Figura 1(d).

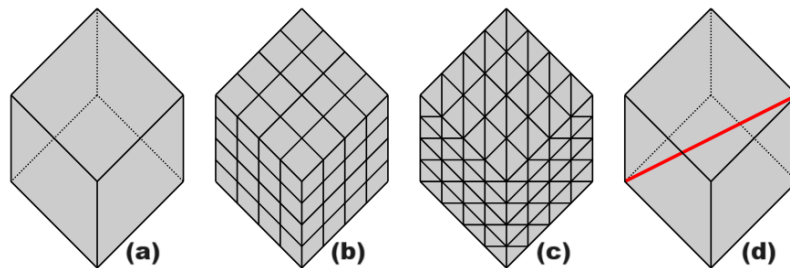


Figura 1: Exemplo de domínio 3D (a), subdivisão em cubos (b), subdivisão em tetraedros (c) e a linha onde serão avaliados os valores para comparação com o caso 1D (d). Fonte: os autores.

Serão utilizadas malhas de cubos com  $128 \times 128 \times 128$  elementos (isto é, subdivididas em 128 elementos em cada eixo),  $256 \times 256 \times 256$ ,  $512 \times 512 \times 512$  e  $1024 \times 1024 \times 1024$ . As malhas de tetraedros utilizam a mesma estrutura da malha de cubos, porém cada elemento cubico é subdividido em seis tetraedros. Note que a malha de tetraedros não possuirá um elemento exatamente na diagonal. Nesse caso, é utilizada a média dos valores dos seis tetraedros que formam o elemento cúbico da diagonal.

Além disso, para este experimento, a seguinte condição CFL será utilizada [1, 2]:

$$\frac{\Delta t}{d_{K,L}} \sup_{u,K,L} \left| \frac{\mathbf{f}(u)}{u} \cdot \mathbf{n}_{K|L} \right| \leq \frac{1}{8} \quad \forall u \in \mathbb{R}. \quad (4)$$

Um código FORTRAN-MPI foi desenvolvido para resolver os problemas escolhidos utilizando o esquema (2) com o fluxo numérico (3). O código utiliza o paradigma MPI [10] para paralelismo, e os exemplos foram executados nos nós de computação B710 do supercomputador Santos Dumont, do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) [8].

### 3.1 Equação de Advecção Linear

A Equação de Advecção Linear, utilizada para descrever o transporte de uma grandeza pelo movimento do fluido no qual ela está inserida, é dada pela equação (1) com a função de fluxo  $\mathbf{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  definida por

$$\mathbf{f}(u) = (u, u, u). \quad (5)$$

A equação (1) será resolvida sobre o domínio  $(t, \mathbf{x}) \in [0, 1] \times \Omega$ ,  $\Omega = [-5, 5]^3$ , tomando como condição inicial a função  $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  dada por

$$u_0(\mathbf{x}) = \exp \left( - \left( \frac{(x_1 - 0)^2}{4} + \frac{(x_2 - 0)^2}{4} + \frac{(x_3 - 0)^2}{4} \right) \right). \quad (6)$$

Na diagonal principal, esse problema pode ser comparado ao caso 1D onde  $u : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  é a solução do PVI

$$\begin{cases} v_t + g(v)_x = 0, & (t, x) \in [0, 1] \times [-5\sqrt{3}, 5\sqrt{3}], \\ g(v) = v\sqrt{3}, & v \in \mathbb{R}, \\ v_0(x) = \exp \left( - \left( \frac{(x-0)^2}{4} \right) \right), & x \in [-5\sqrt{3}, 5\sqrt{3}]. \end{cases} \quad (7)$$

### 3.2 Equação de Burgers Invíscida

A Equação de Burgers Invíscida, que pode ser considerada um protótipo para leis de conservação que produzem descontinuidades, pode ser escrita pela equação (1) em conjunto com a função de fluxo  $\mathbf{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  dada por

$$\mathbf{f}(u) = \left( \frac{u^2}{2}, \frac{u^2}{2}, \frac{u^2}{2} \right). \quad (8)$$

A mesma condição inicial (6) e domínio do problema anterior serão utilizados neste caso. Assim, o problema 1D compatível será o PVI escrito como

$$\begin{cases} v_t + g(v)_x = 0, & (t, x) \in [0, 2] \times [-5\sqrt{3}, 5\sqrt{3}], \\ g(v) = \frac{v^2}{2}\sqrt{3}, & v \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (9)$$

com o mesmo dado inicial (6) e  $(t, \mathbf{x}) \in [0, 2] \times \Omega$ ,  $\Omega = [-5, 5]^3$ .

Apesar da aparente simplicidade, a Equação de Burgers (e sua versão invíscida) pode ser obtida por meio de uma simplificação da Equação de Navier-Stokes, a saber, a equação de momento com a remoção do termo de pressão. O modelo de Burgers é fundamental em turbulência e aparece em diversas aplicações interessantes de física, matemática e engenharia devido aos recentes progressos no nível computacional e experimental; para maiores detalhes, ver, e.g., as referências clássicas neste tema, considerando os aspectos unificados: teoria, computacional e aplicações não triviais [4, 7].

### 3.3 Resultados da Comparação com o Caso 1D

Observa-se na Figura 2 que o comportamento do método Lagrangiano-Euleriano 3D Totalmente Discreto dentro do domínio tridimensional é qualitativamente semelhante ao caso 1D equivalente, tanto na Equação de Advecção Linear quanto na Equação de Burgers Invíscida, amplamente utilizada em mecânica dos fluidos.

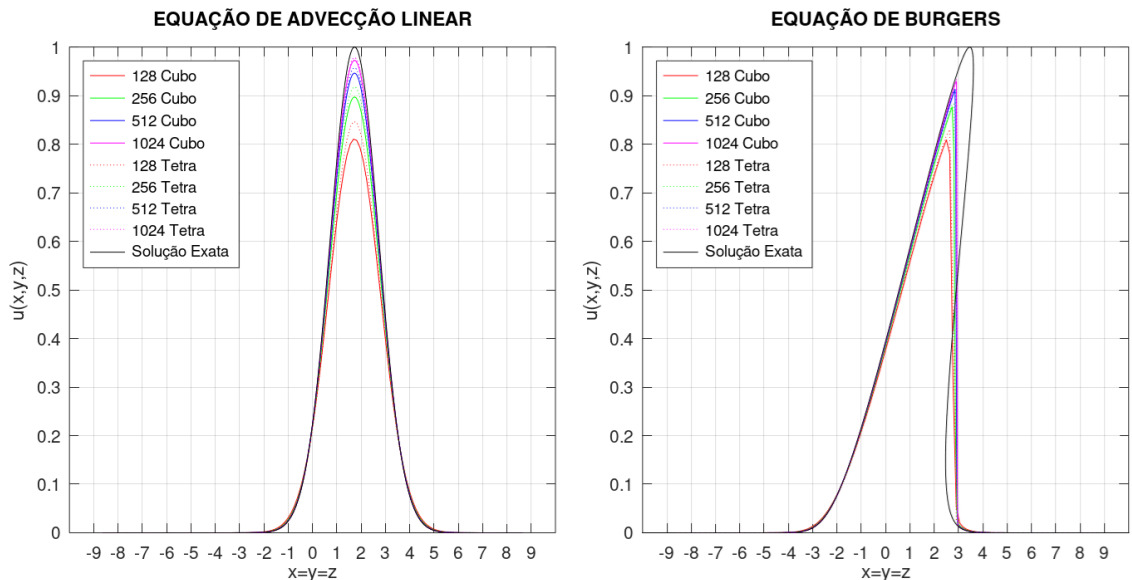


Figura 2: Comportamento das soluções na diagonal principal do domínio em várias malhas. A solução exata paramétrica do caso 1D compatível foi obtido conforme [5]. Fonte: os autores.

Deve-se ressaltar que os resultados exibidos na Figura 2 foram obtidos coletando os valores da diagonal principal dentro de um domínio 3D após uma simulação em três dimensões. Assim, apesar de todas as dinâmicas ocorrerem nos três eixos espaciais, a semelhança qualitativa esperada com o resultado 1D é mantida pelo método, com melhoria a cada refinamento de malha.

Além disso, os dois casos foram resolvidos utilizando o mesmo código, sem qualquer alteração, isto é, por meio da aplicação direta do método (2) com o fluxo numérico (3), submetidos a condição CFL (4), indicando assim que outros modelos hiperbólicos e outras condições iniciais podem ser aproximadas pelo mesmo método.

## 4 Estudo de Paralelismo e Escalabilidade

Para problemas tridimensionais, a medida que a malha computacional é refinada, o número de elementos a serem calculados aumenta muito rapidamente. Nos casos apresentados anteriormente, a malha  $1024 \times 1024 \times 1024$  de cubos contém mais de 1 bilhão de elementos, ao passo que a de tetraedros possui mais de 6 bilhões. Isso implica um grande gasto de tempo computacional para resolução do esquema, além de alta capacidade de memória para armazenar os resultados. Desta maneira, para garantir a aplicabilidade do esquema, faz-se necessário verificar sua escalabilidade para uso de múltiplos processadores.

Neste estudo, a escalabilidade será avaliada por meio do *speedup* relativo, como definido em [9].

Serão utilizados os mesmos problemas teste anteriores, com a malha  $1024 \times 1024 \times 1024$ , tanto para cubos como para tetraedros. Entretanto, em vez de fixar um tempo final  $t_f$  para cada caso, a simulação irá executar 1000 passos no tempo e encerrar. O tempo de execução será medido para o programa utilizando 32, 64, 128, 256, 512 e 1024 processadores (*cores*).

Conforme [9], o *speedup* relativo a 32 processadores ( $S_N$ ) será obtido por

$$S_N = 32 \frac{T_{32}}{T_N} \quad (10)$$

no qual  $T_{32}$  é o tempo computacional utilizando 32 processadores, e  $T_N$  o tempo utilizando  $N$  processadores. Note que o resultado é multiplicado por 32 apenas para facilitar a interpretação do valor obtido, sendo que, de tal forma,  $N$  torna-se o valor ideal para o resultado.

Os experimentos foram executados nos nós de computação B710 do supercomputador Santos Dumont, do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) [8], recorrendo-se ao mesmo código FORTRAN utilizado na comparação com caso 1D.

### 4.1 Resultados de Escalabilidade

Os resultados de escalabilidade estão apresentados nas Tabelas 1 e 2. Além disso, os valores de *speedup* também estão ilustrados na Figura 3.

Tabela 1: Tempo de execução (hh:mm:ss) e *speedup* relativo para Equação da Advecção Linear.

<i>Cores</i>	Tempo (Cubos)	<i>Speedup</i> (Cubos)	Tempo (Tetras)	<i>Speedup</i> (Tetras)
32	01:00:09	32.00	08:51:28	32.00
64	00:34:55	55.10	04:29:32	63.09
128	00:17:41	108.80	02:17:34	123.62
256	00:08:56	215.12	01:08:33	248.08
512	00:04:25	435.24	00:34:19	495.52
1024	00:02:14	857.54	00:17:18	982.22

Tabela 2: Tempo de execução (hh:mm:ss) e *speedup* relativo para Equação de Burgers.

<i>Cores</i>	Tempo (Cubos)	<i>Speedup</i> (Cubos)	Tempo (Tetras)	<i>Speedup</i> (Tetras)
32	01:44:00	32.00	16:37:24	32.00
64	00:44:20	75.05	08:21:00	63.70
128	00:25:49	128.89	04:17:37	123.89
256	00:13:01	255.36	01:49:51	290.51
512	00:06:30	511.94	01:04:00	498.63
1024	00:03:19	1003.27	00:32:03	995.63

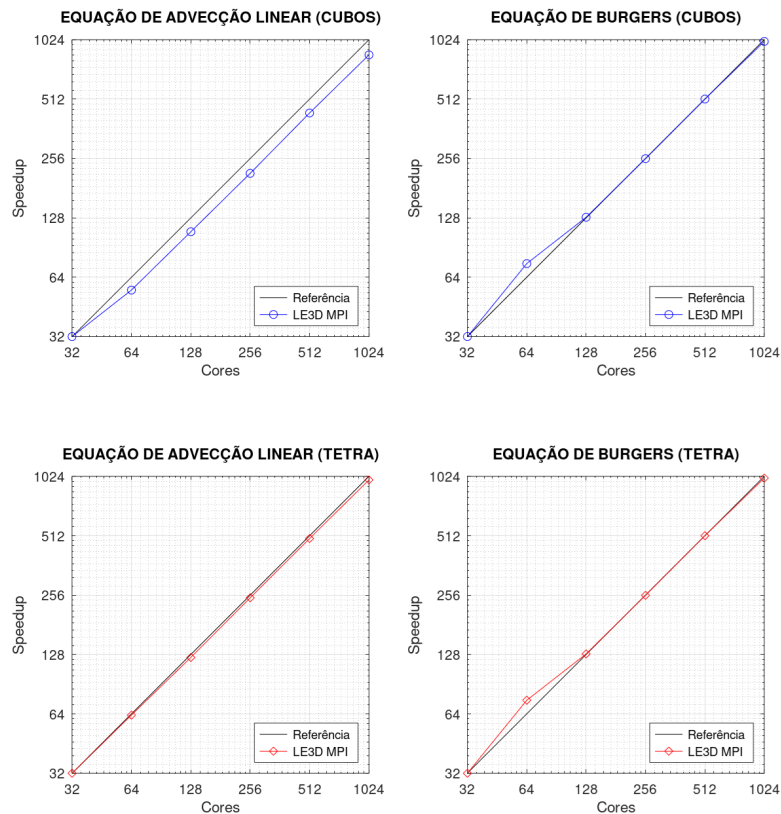


Figura 3: *Speedup* relativo dos casos avaliados. A linha de referência indica o *speedup* perfeito. Resultados acima da referência indicam uma escalabilidade superlinear enquanto abaixo representam escalabilidade sublinear. Os gráficos são apresentados numa escala log x log. Fonte: os autores.

Conforme apontado pelos resultados, principalmente aqueles observados na Figura 3, o método Lagrangiano-Euleriano 3D Totalmente Discreto escala eficientemente com o número de processadores disponíveis, apresentando um crescimento próximo ao linear em todos os problemas teste.

## 5 Considerações Finais

O método Lagrangiano-Euleriano, como visto em [1, 2] apresenta várias vantagens em relação a outros métodos para problemas hiperbólicos, entre elas a ausência da necessidade de calcular autovalores ou resolver problemas de Riemman. No presente trabalho, verifica-se que extensão direta do método para 3D em sua forma totalmente discreta mantém qualitativamente a capacidade de resolver problemas de leis hiperbólicas, com evidências de que o refinamento de malha reduz o erro relativo da solução. Com isso, outros *benchmarks* estão sendo propostos, como a Equação de Buckley-Leverett, que apresenta envelope não-convexo, e casos multi-D para sistemas [6]. Além disso, a implementação FORTRAN-MPI do método mostra boa escalabilidade para múltiplos processadores, viabilizando seu uso prático em malhas finas para aplicação em problemas reais de grande porte como, por exemplo, em dinâmica dos fluidos [1, 5].

Assim, o prospecto de uma análise mais aprofundada do método Lagrangiano-Euleriano 3D Totalmente Discreto, em conjunto com sua formulação Semi Discreta e respectiva análise e valida-

ção, como vem sendo realizado em [6], demonstra-se relevante, indicando que as propriedades das formulações 1D e 2D se mantenham para o caso 3D.

## Agradecimentos

E. Abreu agradece o apoio financeiro recebido do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) (Processo nº 307641/2023-6) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) (Processo nº 2022/15108 -0). P. Godoi agradece o apoio financeiro recebido do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) (Processo nº 140196/2024-2). Além disso, os autores agradecem o Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC/MCTI) pelos recursos computacionais, em especial pelo uso do supercomputador SDumont.

## Referências

- [1] E. Abreu, J. Agudelo, W. Lambert e J. Perez. “A Lagrangian–Eulerian Method on Regular Triangular Grids for Hyperbolic Problems: Error Estimates for the Scalar Case and a Positive Principle for Multidimensional Systems”. Em: **Journal of Dynamics and Differential Equations** (2023), pp. 1–66. DOI: 10.1007/s10884-023-10283-1.
- [2] E. Abreu e J. Perez. “A fast, robust, and simple Lagrangian–Eulerian solver for balance laws and applications”. Em: **Computers & Mathematics with Applications** 77 (2019), pp. 2310–2336. DOI: 10.1016/j.camwa.2018.12.019.
- [3] C. M. Dafermos. **Hyperbolic Conservation Laws in Continuum Physics**. 4a. ed. Berlin, Alemanha: Springer, 2016. ISBN: 9783662494493.
- [4] U. Frisch e J. Bec. “Burgulence”. Em: **New trends in turbulence. Turbulence: nouveaux aspects: Les Houches Session LXXIV 31 July - 1 September 2000**. Ed. por M. Lesieur, A. Yaglom e F. David. Springer, 2002. Cap. 7, pp. 341–383. DOI: 10.1007/3-540-45674-0\_7.
- [5] E. Godlewski e P. Raviart. **Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws**. 2a. ed. New York, USA: Springer, 2021. ISBN: 9781071613429.
- [6] P. H. V. Godoi. “Fully-discrete and semi-discrete Lagrangian–Eulerian formulations for conservation laws on 3D tetrahedral meshes with applications”. Tese de doutorado. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas (IMECC/UNICAMP) (2022–Em Progresso, com defesa esperada em Fevereiro 2026).
- [7] M. Lesieur, A. Yaglom e F. David. **New trends in turbulence. Turbulence: nouveaux aspects: Les Houches Session LXXIV 31 July - 1 September 2000**. 1a. ed. Berlin, Alemanha: Springer, 2003. ISBN: 9783540456742.
- [8] LNCC. **Configuração do SDumont**. Online. Acessado em 11/03/2024, <https://sdumont.lncc.br/machine.php?pg=machine>.
- [9] M. McCool, A. D. Robison e J. Reinders. **Structured Parallel Programming. Patterns for Eddicient Computation**. 1a. ed. Waltham NA, USA: Morgan Kaufmann, 2021. ISBN: 9780124159938.
- [10] Open MPI Team. **Open MPI: Open Source High Performance Computing**. Online. Acessado em 11/03/2024, <https://www.open-mpi.org/>.