



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA**

Landry Pereira da Silva

**MODELAGEM DIRETA 3D DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA
UTILIZANDO PROCESSAMENTO PARALELO**

Belém-Pará
2010

Landry Pereira da Silva

**MODELAGEM DIRETA 3D DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA
UTILIZANDO PROCESSAMENTO PARALELO**

Dissertação de Mestrado apresentada para obtenção do grau de Mestre em Matemática e Estatística. Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística. Instituto de Ciências Exatas e Naturais. Universidade Federal do Pará.

Área de concentração Métodos Matemáticos Aplicados.

Orientador Prof. Dr. Valcir João da Cunha Farias.

Belém-Pará
2010

Silva, Landry Pereira da.

S586m Modelagem Direta 3D de dados de Polarização induzida utilizando Processamento Paralelo / Landry Pereira da Silva; orientador, Valcir João da Cunha Farias. – 2010.
65 f.: il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística, Belém, 2010.

1. Polarização induzida. 2. Modelagem Direta 3D de Dados. 3. Processamento Paralelo. I. Farias, Valcir João da Cunha, orient. II. Universidade Federal do Pará, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística. III. Título.

CDD - 22. ed. 535.52

Landry Pereira da Silva

**MODELAGEM DIRETA 3D DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA
UTILIZANDO PROCESSAMENTO PARALELO**

Dissertação de Mestrado apresentada para obtenção do grau de Mestre em Matemática e Estatística. Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística. Instituto de Ciências Exatas e Naturais. Universidade Federal do Pará.

Data da aprovação: Belém-PA. 01-07-2010

Banca examinadora

Prof. Dr. Valcir João da Cunha Farias
Instituto de Matemática – UFPA - Orientador

Prof. Dr. Héilton Ribeiro Tavares
Instituto de Matemática – UFPA - Membro

Prof. Dr. Marcus Pinto da Costa da Rocha
Instituto de Matemática – UFPA - Membro

Prof. Dr. Antônio Pereira Júnior
UFRN - Membro

Aos meus pais, esposa,
familiares e amigos,
minha eterna gratidão.

AGRADECIMENTOS

Ao fiel e misericordioso Deus, que me ilumina e guia minha vida durante cada instante, sem ele não há vida e é impossível obter vitória se não seguirmos vossa vontade.

Aos meus familiares e amigos, por e estarem sempre comigo em todo tempo e lugar, pelo apoio dedicação e preocupação demonstrada durante esta jornada.

Ao meu pai, João Batista, pelo trabalho duro realizado para dar a mim e a meus irmãos oportunidade de um futuro mais feliz; e a minha querida mãe Sra. Cordélia, por seu amor e dedicação incondicional, um exemplo de integridade, honestidade e perseverança que procuro me espelhar em todos os dias de minha vida.

A minha esposa Andréia, por ter compreendido que os grandes períodos em que ficamos separados foram fundamentais para que hoje pudéssemos usufruir de uma união cada vez mais sólida e feliz, sob a graça de DEUS.

Às minhas irmãs Luana e Luany por sempre me fazer sorrir até mesmo quando a situação ficava desesperadora durante o desenvolvimento deste trabalho; e ao meu sobrinho e amigo Sidney Alan, o garoto que com seu carinho e alegria sempre me ajudou a levantar a cabeça, seguir em frente e não abater na adversidade.

Ao orientador, Valcir Farias, por sua atenção, tranquilidade e amizade durante todo este trabalho, sempre transmitindo seu conhecimento. Por ser compreensivo e incentivador quando alguma dificuldade surgia, mas não se furtando de chamar atenção no momento que era necessário.

A todos os companheiros e integrantes do Laboratório de Análise e Medidas LAM – LACA, em especial aos amigos Iadelmar, Antônio, Isilda e Márcio, pelo companheirismo demonstrado durante os intermináveis dias de estudo que se seguiam depois de ter enfrentado noites em claro dentro de ônibus no percurso de Tucuruí a Belém, quase que semanalmente, para assistir a aula e conseguir aprovação em Análise Real e Processos Estocásticos.

Ao Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística da Universidade Federal do Pará, que por intermédio de sua equipe de professores e suas disciplinas fizeram perceber que é um grande desperdício passar uma noite inteira dormindo e que da meia noite às seis da manhã é possível realizar muitas coisas.

Ao IFPA e a CAPES, por todo o investimento logístico, material e apoio financeiro dado para a realização deste trabalho.

“Tudo que acontece dá
para imaginar, tudo que se
imagina pode acontecer”
William Shakespeare.

RESUMO

Neste trabalho são apresentados estudos sobre aplicabilidade do método da modelagem direta 3D de dados de polarização induzida no domínio da frequência, tendo como suporte para obtenção dos resultados a utilização de algoritmos sobre modelos matemáticos criados para serem executados sobre plataformas de hardware e software isoladas e paralelas (cluster).

Na prospecção geofísica realizada por meio do fenômeno geoeletrico da polarização induzida e sua modelagem direta de dados no domínio da frequência é determinada a resistividade complexa aparente de uma determinada região do solo por uma configuração de eletrodos distribuídos sobre sua superfície, verificando com isso a condutividade em sua sub-superfície. Neste trabalho assume-se um modelo de condutividade complexa 3D, não sendo considerados os efeitos eletromagnéticos ocorridos.

Ao final, a precisão dos resultados e o tempo de resposta obtido são comparados e observada a evolução ocorrida com o uso das tecnologias de hardware e software aplicadas neste trabalho em relação aos estudos de Farias(1994) já realizado e aqui utilizado como referência.

PALAVRAS-CHAVE: Polarização induzida, Modelagem direta 3D de dados, Programação em Cluster, Algoritmos para modelagem de dados, Processamento paralelo.

ABSTRACT

This paper presents studies on the applicability of the method of direct modeling of 3D induced polarization data in the frequency domain, with the support to obtain results on algorithms using mathematical models designed to run on hardware platforms and software and isolated parallel (cluster).

In geophysical prospecting carried out by means of induced polarization phenomenon geoelectrical modeling their data directly in the frequency domain and determined the apparent complex resistivity in a given region of the ground by a configuration of electrodes distributed on its surface, thereby checking the conductivity of its subsurface. In this work we assume a complex 3D model of conductivity, not considering the electromagnetic effects occurring.

Finally, the accuracy of the results obtained and the response time, are compared and we observe the evolution that occurred with the use of technology hardware and software used in this work, in relation to studies of Farias (1994) has performed and used here as reference

KEYWORDS: Polarization induced direct 3D data modeling, Cluster Programming, Algorithms for data modeling, parallel processing.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1	Divergente de \vec{F}	17
Figura 2.2	Divergente de \vec{F} aplicado ao fluxo de corrente para fora do sólido.....	18
Figura 2.3	Exemplo de elemento – tridimensional.....	28
Figura 3.1	Tetraedro e paralelepípedo.....	33
Figura 3.2	Padrão de esparsidade da matriz M para uma malha 5x5x3 nós.....	36
Figura 3.3	Exemplo da malha de elementos finitos com eletrodos e número de nós..	40
Figura 5.1	Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa para uma camada.....	51
Figura 5.2	Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa para duas camadas.....	52
Figura 5.3	Comparação entre a solução analítica e a solução por elementos finitos para o modelo com duas camadas.....	53
Figura 5.4	Modelo 3D formado por paralelepípedo embebido em meio homogêneo, ambos polarizáveis com resistividade complexa dada pelo modelo fractal para resistividade complexa.....	54
Figura 5.5	Pseudo-seções da resistividade complexa aparente, na forma de amplitude (parte superior) e ângulo de fase (parte inferior).....	58
Figura 5.6	Gráfico comparativo entre modelos serial, paralelo e de Farias(2004) ...	61

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1	Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa para uma camada.....	51
Tabela 5.2	Parâmetros do modelo fractal de resistividade complexa para duas camadas.....	52
Tabela 5.3	Especificação do computador usado em processamento centralizado....	52
Tabela 5.4	Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa da amostra vnh-6.....	54
Tabela 5.5	Especificação dos computadores do cluster.....	57

LISTA DE SIMBOLOS

IP	Induced Polarization
SSOR	<i>symetric successive over-relaxation</i>
MEC	Método dos Elementos de Contorno
MDF	Método da Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
SISD	<i>single instruction stream, single data stream</i>
MISD	<i>multiple instructrion stream, single data stream</i>
SIMD	<i>single instruction, multiple data</i>
MIMD	<i>multiple-instruction stream multiple-data stream</i>
PVM	<i>Paralel Virtual Machine</i>
MPI	<i>Message Passing Interface</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
2	ESTUDO SOBRE POLARIZAÇÃO INDUZIDA: MÉTODOS E TEOREMAS AUXILIARES EM MODELAGEM 3D.....	16
2.1	Polarização Induzida.....	16
2.1.1	Definição.....	16
2.1.2	Aplicação.....	16
2.1.3	Medidas em Polarização Induzida.....	17
2.1.3.1	<i>Polarização Induzida no Domínio do tempo.....</i>	<i>17</i>
2.1.3.2	<i>Polarização induzida no domínio da freqüência.....</i>	<i>17</i>
2.1.4	Cargueabilidade.....	17
2.2	Gradiente e Divergente.....	18
2.2.1	Informações iniciais.....	18
2.2.2	Teorema da Divergência.....	21
2.3	Equação de Poisson.....	23
2.4	Métodos numéricos utilizadas em polarização induzida.....	24
2.4.1	Método da Equação Integral.....	24
2.4.1.1	<i>Teorema de Green.....</i>	<i>25</i>
2.4.2	Método das Diferenças finitas.....	27
2.4.3	Método dos Elementos finitos.....	29
3	MODELAGEM DIRETA 3D DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA.....	32
3.1	Introdução.....	32
3.2	Modelagem direta 3D.....	32
3.2.1	Solução por elementos finitos.....	33
3.2.2	Determinação da matriz elementar.....	35
3.2.3	Condições de contorno.....	37
3.2.4	Solução do Sistema de Equações Lineares.....	37
3.2.4.1	<i>Método de decomposição LU.....</i>	<i>39</i>
3.2.4.2	<i>Método Iterativo do Gradiente Bi-Conjugado pré condicionado.....</i>	<i>41</i>

4	COMPUTAÇÃO PARALELA: CONCEITOS E APLICAÇÕES.....	43
4.1	Introdução.....	43
4.2	Arquiteturas paralelas.....	44
4.3	Sistema com Múltiplos Processadores.....	45
4.3.1	Sistemas Fortemente acoplados.....	45
4.3.2	Sistemas Fracamente acoplados.....	45
4.4	Clusters.....	46
4.5	Tipos de cluster.....	47
4.5.1.	Cluster de Alta Disponibilidade (High Availability – HÁ).....	47
4.5.2.	Cluster de balanceamento de carga (Load Balancing).....	47
4.5.3.	Cluster de alto desempenho.....	47
4.5.3.1	<i>Arquitetura de Cluster de estações de trabalho (Workstation)</i>	48
4.5.3.2	<i>Arquitetura de Cluster Beowulf</i>	48
4.5.3.3	<i>Arquitetura de Cluster MOSIX</i>	49
4.6	Bibliotecas para desenvolvimento de programas usando processamento paralelo.....	49
4.6.1	PVM (Parallel Virtual Machine).....	50
4.6.2	MPI (Message Passing Interface).....	50
5	PROCEDIMENTO PARA INTERPRETAÇÃO DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA – MODELAGEM DIRETA.....	52
5.1	Introdução.....	52
5.2	Procedimento de Interpretação.....	52
5.3	Aplicação do Procedimento em Modelagem 3D.....	53
5.3.1	Obtenção dos Resultados - Modelagem do Perfil 1.....	59
5.3.2	Aplicação dos algoritmos de modelagem 3D.....	60
5.4	Verificação dos Resultados.....	61
6.	CONCLUSÃO.....	62
7.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	64

INTRODUÇÃO

A viabilidade em localização, mapeamento e obtenção, de maneira não invasiva, de dados relevantes às possíveis características das feições geológicas de uma região, como por exemplo, fraturas e afundamentos de solo (Gallas, 1999 e 2001), rochas e demais resíduos orgânicos ou minerais (Moura, 2007; Moreira, 2008) que estejam imersos no subsolo de uma região qualquer, corresponde a uma característica marcante da utilização do fenômeno de Polarização Induzida (IP) em estudos sobre prospecção geoeletrica. Tal recurso é de grande valia, pois evita a realização de perfurações ou escavações na região de estudo, mantendo com isso a integridade do solo e do subsolo, preservando assim as suas características naturais.

O fenômeno de **Polarização Induzida (IP)** é percebido e caracterizado por meio do acúmulo de carga ocorrido em terrenos que outrora estiveram sob a incidência de correntes elétricas, e embora tenha sido verificado antes da década de 20, estudos sobre sua aplicação realizaram-se de forma mais significativa somente a partir de 1940, em prospecção de metais base e mais recente à exploração de águas subterrâneas sendo que atualmente estão sendo realizados diversos estudos sobre o fenômeno da IP aplicados nas Engenharias e em geologia, conjuntamente com a utilização de modelagem matemática e computacional que auxiliam na obtenção e no tratamento dos dados auxiliares que contribuem na descrição de uma determinada região.

No capítulo 2 é feita uma revisão de estudos já realizados sobre fenômeno da polarização Induzida e sua aplicabilidade, sendo também apresentadas equações que contribuem para o desenvolvimento de modelagem de dados correspondente ao referido fenômeno.

No capítulo 3 são descritos métodos matemáticos utilizados em modelagem direta de dados de Polarização Induzida a partir da demonstração dos procedimentos para discretização da equação de Poisson (usada na determinação do potencial elétrico em uma região qualquer), os quais possibilitam a obtenção dos dados finais correspondentes ao modelo de dados.

O capítulo 4 corresponde ao detalhamento sobre arquiteturas de computadores paralelos assim como métodos e bibliotecas utilizados no desenvolvimento de aplicações paralelas

que contribuam para a análise, discretização e obtenção de dados referentes a modelagem direta de dados de Polarização Induzida (especialmente em regiões 3D) de forma rápida e eficiente.

No capítulo 5 é apresentada a aplicação dos métodos matemáticos aliados aos recursos e técnicas computacionais descritos nos capítulos 2 e 3 para a interpretação de dados de polarização induzida no domínio da frequência, tendo como referência os dados provenientes do modelo fractal para a resistividade complexa obtidos por Rocha(1995) e os procedimentos de investigação realizados por Farias(2004). Objetiva-se ao final buscar a discriminação geológica por meio da modelagem sintética em 3D, voltada à aplicação do método de IP para detecção de possível contaminação de uma determinada região do meio ambiente analisado por meio de agentes orgânicos e químicos.

Por fim, capítulo 6 dedica-se à apresentação das conclusões e considerações finais referentes aos resultados obtidos nesta dissertação, onde são apontadas as dificuldades encontradas durante o desenvolvimento deste trabalho, assim como as perspectivas geradas pelo mesmo e contribuições para o desenvolvimento de trabalhos e estudos futuros.

CAPÍTULO 2

ESTUDO SOBRE POLARIZAÇÃO INDUZIDA: MÉTODOS E TEOREMAS AUXILIARES EM MODELAGEM 3D.

2.1 – POLARIZAÇÃO INDUZIDA.

2.1.1- Definição

De acordo com Ferreira(2002), quando uma corrente elétrica aplicada por meio de eletrodos em um terreno é interrompida, observa-se que a tensão voltagem entre os mesmos não é anulada imediatamente, pois é passível a ocorrência de concentrações de carga em partes do espaço analisado e, por algum período de tempo, uma determinada fração da voltagem inicial permanece no terreno enquanto as concentrações de cargas são dissipadas. À ocorrência deste fenômeno é o que denominamos de **Polarização Induzida (IP)** e atualmente estão sendo realizados diversos estudos sobre sua aplicabilidade, em especial em pesquisa geoeletrica de feições geológicas de forma não invasiva e mantendo a integridade da região alvo de estudo, apenas utilizando modelos matemáticos computacionais que simulam e apresentam as possíveis propriedades e características desta região.

2.1.2 – Aplicação

Em estudos eletroquímicos sobre passagem de corrente elétrica em um sistema eletrodo-eletrólito, verificou-se a existência de **sobrevoltagem (overvoltage)**, isto é, um potencial extra que surgiu devido às barreiras eletroquímica e eletrocinética criadas entre os eletrodos e o meio que a corrente circula. Estes estudos tornaram o fenômeno IP conhecido e sabe-se hoje que em IP esta sobrevoltagem é proporcional a densidade de corrente.

Hoje o fenômeno de IP está sendo utilizado em experimentos e pesquisas referentes a exploração de águas subterrâneas e petróleo; análise de resistividade do solo para malha de aterramento (Rocha, 1995); prospecção de metais, rochas e resíduos orgânicos no sub-solo além de outros estudos envolvendo pesquisa geoeletrica.

2.1.3 - Medidas em Polarização Induzida

Para um fluxo de corrente, a polarização induzida manifesta-se em dependência da:

- a) resistência aparente de corpos ou substâncias do terreno ao fluxo de correntes alternadas (Impedância do meio);
- b) frequência da corrente.

O fenômeno da polarização induzida pode ser mensurado no domínio do tempo (similar a descarga de um capacitor) ou no domínio da frequência (variação de impedância de uma corrente alternada).

2.1.3.1 - Polarização Induzida no Domínio do tempo

Em medidas de polarização induzida utilizando pulsos de corrente contínua em um período T , a magnitude deste fenômeno é chamada de Polarizabilidade (P_t^T) e é expressa por:

$$P_t^T = \frac{\Delta V}{V} \quad (\text{milivolt/volt})$$

onde,

$\frac{\Delta y}{\Delta x}$: voltagem remanescente em um período T , após o pulso;

V : voltagem com corrente circulante;

t : fração de T .

2.1.3.2 - Polarização Induzida no Domínio da frequência.

A resistividade aparente da região é mensurada por eletrodos através de duas frequências (F e f), sendo $f < F$. O IP é expresso como o efeito de frequência aparente (FE) e define-se pela diferença entre as resistividades aparentes nas duas frequências, dividido pela resistividade aparente de qualquer uma delas.

$$M = FE_{F,f} / (1 + FE_{E,f})$$

2.1.4 - Cargueabilidade.

Entre os parâmetros utilizados em polarização induzida no domínio do tempo temos em especial a **cargueabilidade**, que pode ser definida por;

- a) propriedade de um material no qual existe um momento de dipolo provocado por uma corrente induzida por unidade de volume P , energizado por uma densidade de corrente J ($M = P/J$);

- b) quantidade de mudança na resistência, medida na curva de decaimento, como função do tempo ($M = \delta\rho(t)/\rho$);
- c) razão de decaimento da voltagem secundária pela voltagem primária;

A unidade de cargueabilidade é o milivolt por volt (mV/V). As medidas parciais de cargueabilidade (M_i) são integradas (somadas), resultando no que denomina-se média global (M_g).

As medidas de cargueabilidade M_i e M_g fornecem informações sobre a capacidade do terreno em carregar-se em como função de um fluxo de corrente elétrica. A cargueabilidade parcial de uma determinada região i é medida por:

$$M_i = \int_{TM_i} V dt / TM_i * V_{MN}$$

e a cargueabilidade global é obtida por:

$$M_g = \sum_{i=1}^n (M_i TM_i) / \sum_{i=1}^n TM_i$$

onde n é igual ao número de regiões IP.

2.2 – Gradiente e Divergente.

2.2.1 – Informações iniciais

Para uma melhor compreensão sobre o teorema da divergência (ou teorema de Gauss) faz-se conveniente comentar sobre o operador **nabla**, representado pelo símbolo ∇ .

Este operador é um operador vetorial, em coordenadas cartesianas representado pelas componentes (x,y,z); e também um operador diferencial, visto que é constituído por meio de derivadas.

Em coordenadas cartesianas, podemos representar matematicamente o operador ∇ como:

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

Se considerarmos agora que uma função escalar f seja aplicada ao operador acima, teremos então:

$$\nabla f = \vec{i} \frac{\partial f}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial f}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial f}{\partial z}$$

ao que denominaremos de **gradiente da função f** (ou **grad f**).

Agora, se considerarmos a existência de um campo (em \mathbf{R}^3)

$$\vec{F} = F_x \vec{i} + F_y \vec{j} + F_z \vec{k}$$

e observarmos ∇ como sendo um vetor cujas componentes são

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Se aplicarmos o produto escalar de ∇ por \vec{F} , obteremos então

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$$

O que denominamos de **divergente de \vec{F}** ou simplesmente **div \vec{F}** .

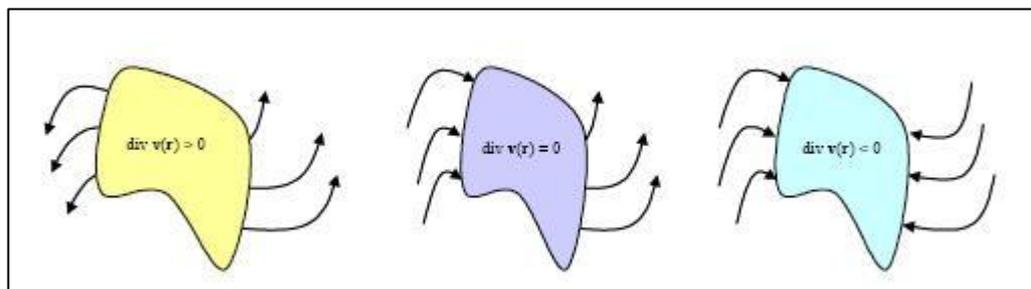


Figura 2.1 – divergente de \vec{F}

Podemos verificar a utilização do gradiente e do divergente por meio da análise do fluxo de uma corrente elétrica para fora de um paralelepípedo infinitesimal, conforme imagem abaixo:

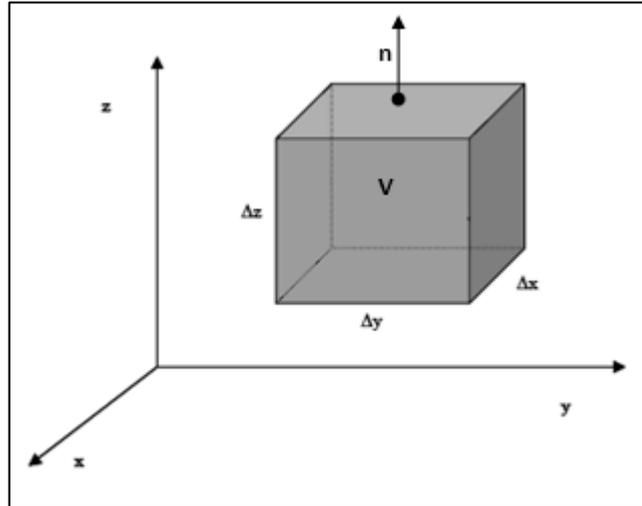


Figura 2.2 – divergente de \vec{F} aplicado ao fluxo de corrente para fora do sólido.

Para calcularmos o fluxo (para fora da superfície) de um paralelepípedo

$$[\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}] \times [\mathbf{y}, \mathbf{y} + \Delta\mathbf{y}] \times [\mathbf{z}, \mathbf{z} + \Delta\mathbf{z}].$$

Para isso teríamos que levar em consideração que o fluxo de corrente ocorre em cada uma das faces do paralelepípedo. Sendo assim teríamos que somar o fluxo ocorrido em cada uma das faces.

Abreviando esta análise, será realizado o cálculo para as faces paralelas ao plano xy, e o mesmo procedimento será aplicado também para as outras quatro faces.

Consideraremos $\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{y}, \Delta\mathbf{z} > \mathbf{0}$.

O fluxo pela face com z fixo pode ser aproximado por

$$- \mathbf{F}_z(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \Delta\mathbf{x} \Delta\mathbf{y}$$

enquanto que o fluxo pela face com z + Δz será

$$\mathbf{F}_z(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} + \Delta\mathbf{z}) \Delta\mathbf{x} \Delta\mathbf{y}.$$

Utilizando a noção de aproximação linear, levando à contribuição somada destas duas faces temos:

$$\frac{\partial F_z}{\partial z} \Delta z \Delta x \Delta y$$

E, repetindo este procedimento para as outras faces do paralelepípedo, poderemos concluir que:

$$\Phi \approx \left\{ \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right\} \Delta x \Delta y \Delta z$$

Onde

Φ : fluxo de corrente do sólido

$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$: as componentes paralelas aos eixos x, y e z, respectivamente

$\Delta x, \Delta y$ e Δz : variação do fluxo de corrente em cada um dos eixos

Observando a análise utilizada para a situação do fluxo de corrente citado acima, conclui-se que as expressões utilizadas motivam a definição de divergência de um campo, onde podemos observar a existência do mesmo vetor utilizado na demonstração do gradiente e que agora atua em um campo vetorial, como se fosse com um produto escalar. Segundo Cunha(2008), em caso de campos elétricos, a divergência está associada a existência de densidades de cargas.

2.2.2 - Teorema da Divergência

Considerando uma região \mathbf{R} qualquer limitada e pertencente ao \mathbf{R}^3 , a sua fronteira ($\partial\mathbf{R}$) será representada por uma superfície orientada. Por convenção, orienta-se que $\partial\mathbf{R}$ está com a normal orientada “para fora” da superfície (fronteira) da região \mathbf{R} analisada. Considere agora que queremos calcular o fluxo de um campo \vec{F} para fora da região \mathbf{R} (ou seja, através de sua fronteira, com a orientação dada). Por definição, temos:

$$\Phi = \iint_{\partial\mathbf{R}} \vec{F} \cdot d\vec{S}$$

Para efeito de solução do problema, subdivide-se a região R em vários pequenos paralelepípedos, de modo que para cada face de paralelepípedo tenha duas alternativas: ou ela pertence a dois paralelepípedos desta subdivisão, ou pertence a um só. Aquelas faces que pertençam a dois paralelepípedos podem ser chamadas faces “interiores”, e em cada paralelepípedo elas terão orientação distinta. Com isso, se calcularmos o fluxo para fora de cada paralelepípedo, será o mesmo que somar apenas nas faces “sem par”, que podem ser chamadas faces da “fronteira”. Assim, obtemos uma nova maneira de calcular o fluxo de \vec{F} para fora da região R , que no limite usualmente calculado por somas de Riemann, se aproxima da integral

$$\Phi = \iiint_R \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV$$

Para que esse argumento tenha sentido, o campo \vec{F} tem que ser bem comportado em todos os paralelepípedos da subdivisão, ou seja, tem que ser bem comportado em R .

Conforme o que foi demonstrado anteriormente, podemos fazer a seguinte definição para o teorema da divergência:

Teorema da Divergência: *Se \vec{F} é um campo bem comportado na região $R \subset \mathbb{R}^3$ com ∂R orientada para fora da região R , vale a igualdade*

$$\iint_{\partial R} \vec{F} \cdot d\vec{S} = \iiint_R \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV$$

e estabelece que a integral da componente normal de qualquer campo vetorial sobre uma superfície fechada é igual à integral da divergência deste campo através do volume envolvido por essa superfície fechada.

Este teorema também pertence à família do teorema fundamental do cálculo, se tratando, mais uma vez, de uma igualdade entre a integral de uma derivada de algo e um termo que só diz respeito a este algo na fronteira da região anterior.

2.3 – Equação de Poisson.

Por definição matemática, a equação de Poisson caracteriza-se como sendo uma equação composta por derivadas parciais expressa por:

$$\nabla^2 \varphi = f$$

Onde,

∇^2 : corresponde ao operador laplaciano;

f e φ : são funções que podem ser reais ou complexas

Esta equação também pode ser representada em um sistema de de coordenadas cartesianas (x,y,z) pela expressão:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(x, y, z) = f(x, y, z).$$

A equação de Poisson apresenta grande utilidade em aplicações nas áreas de física, geologia e nas engenharias mecânica, elétrica, entre outras.

Em estudos sobre polarização induzida, objeto deste trabalho, o problema referente a determinação do potencial elétrico de um meio qualquer é solucionado por meio da resolução da seguinte equação de Poisson:

$$\nabla \cdot [\sigma(x, y, z) \nabla V(x, y, z)] = -I \delta(x) \delta(y) \delta(z)$$

Onde,

$V(x, y, z)$: é o potencial elétrico;

I : é a intensidade de corrente aplicada;

$\sigma(x, y, z)$: condutividade complexa do meio definido pela região (Ω) cujo contorno é $\partial\Omega$;

δ : é definida como a função delta de Dirac (função impulso)

Para a resolução de uma equação de Poisson pode se utilizar de vários métodos como, por exemplo, uma função de Green; assim como métodos numéricos como o Método das diferenças finitas (MDF), ou o método dos elementos finitos (MEF), descritos a seguir.

2.4. Métodos numéricos utilizadas em polarização induzida

Para que possamos realizar a montagem da matriz de dados em IP e encontrar a solução numérica para o modelo direto de dados, podemos fazer uso dos seguintes métodos:

- Método da equação integral
- Método das diferenças finitas
- Método dos elementos finitos

Detalhes referentes ao princípio de implementação e utilização de um dos métodos citados serão realizados a seguir, sendo que neste trabalho será dada maior ênfase ao Método dos Elementos Finitos por permitir uma discretização mais simples e por ser mais eficiente em termos computacionais.

2.4.1 - Método da Equação Integral

Também conhecido por Método dos Elementos de Contorno (MEC), é um método numérico para a solução de equação diferencial parcial bastante utilizado em engenharia e baseia-se na transformação de equações diferenciais em equações integrais sobre o contorno ou fronteira da região estudada, eliminando por meio de sua formulação as operações no interior do domínio e restando somente operações relativas ao contorno, conseguindo com isso uma redução do número da dimensão espacial do problema.

O método pode ser expresso pelos seguintes procedimentos:

- obtenção da equação integral de contorno a partir da equação diferencial do problema;
- discretização do contorno e resolução numérica da equação;
- montagem das matrizes e solução do sistema de equações.

A transformação da equação diferencial do problema pode ser feita através de Teoremas clássicos como a *Identidade de Somiglana* para problemas referentes à elasticidade, ou as Identidades de Green (Teorema de Green). A demonstração a seguir foi descrita por Romanini(1990) para a solução de problemas de potencial:

2.4.1.1. Teorema de Green

Considerando L um operador diferencial linear descrito pelo somatório:

$$L = \sum_{|\mathbf{k}| \leq p} \mathbf{a}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \mathbf{D}^{\mathbf{k}}$$

Onde $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = a_{k_1 \dots k_n}(x_1, \dots, x_n)$ são funções arbitrárias

Assumindo que u e v são funções que possuem derivadas contínuas de ordem p no \mathbf{R}_n , isto é, $D^{\mathbf{k}}u$ e $D^{\mathbf{k}}v$ são contínuas para todo \mathbf{k} e $|\mathbf{k}| \leq p$. então pode-se mostrar que:

$$\mathbf{v}L\mathbf{u} - \mathbf{u}L^*\mathbf{v} = \text{div } \mathbf{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$$

onde,

\mathbf{J} é uma forma vetorial bilinear em \mathbf{u} e \mathbf{v} , que envolvem apenas derivadas de u e v com ordem menor que $p-1$, e L^* é chamado de adjunto de L e descrito por:

$$L^*\mathbf{v} = \sum_{|\mathbf{k}| \leq p} (-1)^{|\mathbf{k}|} \mathbf{D}^{|\mathbf{k}|}(\mathbf{a}_{\mathbf{k}}\mathbf{v})$$

A forma integral da expressão anterior é conhecida como Teorema de Green e expressa por:

$$\int_R (\mathbf{v}L\mathbf{u} - \mathbf{u}L^*\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} = \int_{\sigma} \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{J} \, ds$$

onde,

\mathbf{R} é uma região limitada em \mathbf{R}_n com superfície σ cuja normal externa é representada por $\boldsymbol{\eta}$

O processo de discretização do contorno faz uso de elementos geométricos definidos, os quais possuem funções de forma específicas. A geometria dos elementos varia com a dimensão do problema estudado. Em problemas bidimensionais (2-D) utilizam-se segmentos de reta ou segmentos curvos; e em problemas tridimensionais (3-D) utilizam-se elementos triangulares ou poligonais planos (como os paralelepípedos)

O maior ou menor refinamento da discretização do contorno influencia a precisão dos resultados finais. Para a montagem das matrizes, são necessárias integrações, que podem ser resolvidas com o auxílio do método da quadratura de Gauss. Em seguida, as matrizes são organizadas de forma a haver N equações lineares e N incógnitas, para que possa ser solucionada por um método qualquer de solução matricial (por exemplo, o método da eliminação gaussiana).

A seguir temos algumas vantagens e desvantagens da utilização do Método de Equação Integral.

Vantagens

- tempo de organização de dados reduzido;
- menor gasto com processamento e armazenamento;
- método de alta precisão;
- não há imposição de aproximações para condições de campo nulo, já que estes não são considerados nas formulações.

Desvantagens:

- implementação matemática mais elaborada;
- matriz solução populosa;
- dificuldades para tratar superfícies delgadas e problemas não-lineares, onde é necessário a modelagem do interior do domínio;

Conforme a observação de suas vantagens e desvantagens, verifica-se que o método da equação integral é mais eficiente quando se estiver realizando a modelagem de um ou mais corpos que encontram-se imersos em um meio homogêneo.

2.4.2 – Método das Diferenças finitas

O método das diferenças finitas é um método de resolução de equações diferenciais (de funções discretas), baseado na aproximação de equações diferenciais por equações diferenças (Burden, 2003). A fórmula de aproximação é obtida da **Série de Taylor** da função derivada.

A Série de Taylor, também conhecida por série de potências, é descrita como sendo uma série de funções que possuem a seguinte a seguinte representação matemática:

$$T(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - a)^n$$

onde

a : constante que representa o centro da série de Taylor, podendo ser uma função real ou complexa (imaginária).

Esta série possui um raio de convergência R com seu valor descrito pela fórmula de Hadamard como:

$$R^{-1} = \limsup_{n \rightarrow \infty} |a_n|^{1/n}$$

convergindo uniformemente em cada circunferência pertencente a série como:

$$|x - a| \leq r < R$$

Se temos a série de Taylor associada a uma função f qualquer, definida em um intervalo aberto, e sendo esta função real ou complexa, diferenciável infinitamente, teremos então uma série representada pela seguinte expressão:

$$T(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n.$$

onde

$f^{(n)}(a)$: n-ésima derivada da função f no ponto a .

Caso a série de Taylor seja aplicada para funções de $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, e definida em torno do ponto $X_0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$, será então representada pela seguinte expressão:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{k \geq 0} \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_0)(x_i - x_i^0) \right)^k,$$

onde, considerando que

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}(X_0) \right)^k = \frac{\partial^k f}{\partial x_i^k}(X_0).$$

Teremos então a expressão

$$\left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_0)(x_i - x_i^0) \right)^k = \sum_{\substack{\alpha_i \in \mathbb{N}, \\ \sum_{i=1}^n \alpha_i = k}} \left(\frac{k!}{\alpha_1! \dots \alpha_n!} \cdot \frac{\partial^k f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}(X_0) \cdot (x_1 - x_1^0)^{\alpha_1} \dots (x_n - x_n^0)^{\alpha_n} \right).$$

Para caso particular da Série de Taylor em que $n = 2$, $X_0 = (x_0, y_0)$, teremos a seguinte expressão:

$$f(x, y) = \sum_{k \geq 0} \frac{1}{k!} \sum_{i=0}^k \frac{k!}{i!(k-i)!} \cdot \frac{\partial^i f}{\partial x^i}(X_0) \cdot \frac{\partial^{k-i} f}{\partial y^{k-i}}(X_0) \cdot (x - x_0)^i \cdot (y - y_0)^{k-i}.$$

Fazendo-se então do uso da série de Taylor, encontraremos o operador de diferenças finitas da derivada, conforme a expressão:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + o(h^2)$$

onde ao isolarmos a derivada $f'(x)$, descrevemos como sendo uma diferença de funções, adicionada por um fator (termo) de erro

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + o(h)$$

e, ao desprezarmos o fator de erro $o(h)$ obtém-se o operador de diferenças finitas correspondente para a primeira derivada da função f , descrita como:

$$Df(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Para exemplificar, observa-se o cálculo do declive, correspondente ao cálculo discreto de $\frac{dy}{dx}$ em um dado ponto x_0 , no qual o seu valor

$$\frac{dy}{dx} = (y_1 - y_0)/(x_1 - x_0)$$

corresponde a uma fórmula de diferenças finitas para o cálculo da primeira derivada.

A seguir são apresentadas as etapas na resolução pelo Método das Diferenças Finitas:

- a) Definir equação diferencial;
- b) Aproximar suas derivadas parciais em equações algébricas;
- c) Definir e dividir o domínio em uma malha regular;
- d) Determinar as condições de contorno e as condições iniciais impostas pelo problema;
- e) Substituir as equações algébricas na equação diferencial;
- f) Resolução do problema;

2.4.3 – Método dos Elementos finitos

O Método dos elementos finitos (MEF) constitui em um método para análise de modelos matemáticos que permitam representar matematicamente a ocorrência de fenômenos físicos ocorridos em meios em meios contínuos, convertendo problemas de valor de contorno em um problema de minimização de um funcional (Coggon,1971; Sasaki, 1994; Zhou & Greenhalgh, 2001).

Esta modelagem pode ser realizada por meio de equações diferenciais ou equações integrais juntamente com suas respectivas condições de contorno pré-definidas e consiste em realizar uma divisão do domínio de integração da região analisada, seja esta bidimensional (2D) ou tridimensional (3D), em um número finito sub-domínios que são denominados de “elementos finitos”, transformando a região então de um meio contínuo em um meio discreto.

Esta divisão da região em sub-domínios é conhecida como malha (grid), e pode ser composta por elementos bidimensionais (como retângulos e triângulos), ou por elementos tridimensionais (como paralelepípedos e tetraedros), os quais por sua vez são compostos por **arestas** (ou faces) e por **nós** (pontos de interseção) das arestas dos elementos da região.

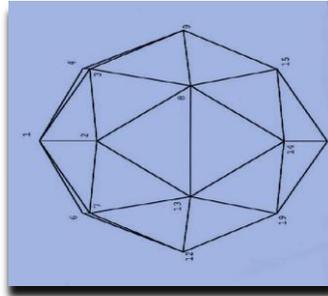


Figura 2.3: exemplo de elemento - tridimensional

É importante ressaltar que o elemento utilizado na modelagem deve possuir uma função conhecida que o defina e satisfaça as condições de contorno, daí a utilização de elementos como o triângulo e o paralelepípedo, por exemplo. Sendo assim, cada elemento da malha terá um funcional π_i e o funcional referente ao domínio da região analisada será composto a soma de todos funcionais do sub-domínios pertencentes à malha:

$$\pi = \sum_{i=1}^n \pi_i$$

e a função de aproximação da malha é descrita por:

$$u = \sum_{j=1}^m \alpha_j \varphi_j$$

onde,

α_j : nós dos elementos representados na função de aproximação;

φ_j : função de forma do elemento pertencente à região analisada

Assim, o funcional completo é descrito por:

$$\pi(\alpha_j) = \sum_{j=1}^n \pi_i(\alpha_j)$$

Aplicando então uma condição de estacionariedade, chega-se então em um sistema de equações algébricas lineares:

$$\delta\pi(\alpha_j) = \sum_{j=1}^n \delta\pi_i(\alpha_j) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{\partial\pi_i(\alpha_j)}{\partial\alpha_i} = 0$$

Este sistema fornece os valores dos parâmetros nodais α_j que podem ser: deslocamentos, forças internas, ou ambos, dependendo da formulação do método dos elementos finitos utilizado.

De acordo com Ferreira(2002), tanto o MDF quanto o MEF permitem a investigação de meios 2D e 3D arbitrários. O método dos elementos finitos é bastante utilizado nas áreas de física e engenharias em geral e geologia, possui também uma fundamentação teórica consistente a qual transmite mais confiabilidade e integridade na modelagem, proporcionar maior praticidade na realização de modelagem para regiões heterogêneas e em meios mais complexos como: o efeito da topografia na resposta, modelagem de heterogeneidades com inclinações, dentre outros.

Outra característica do MEF é de não apresenta problemas de singularidades nas proximidades da fonte na modelagem geométrica, pois conforme Ferreira(1994) este problema é naturalmente e efetivamente suavizado na minimização do funcional dado na forma integral, em contraponto ao MDF, no qual faz-se necessário a aplicação de uma metodologia bem elaborada para remover a singularidade da fonte (Farias, 1994) ou deve-se refinar a malha na vizinhança da fonte.

Devido as características favoráveis verificadas, este método será utilizado como referência no estudo sobre modelagem direta 3D de dados de polarização induzida a que se propõe este trabalho e a implementação do método, assim como seus procedimentos aplicados ao problema proposto serão detalhados no capítulo 02, onde serão demonstrados matematicamente todas as etapas aplicadas para a referida modelagem.

CAPITULO 3

MODELAGEM DIRETA 3D DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA

3.1 – Introdução.

Neste capítulo serão abordados os métodos matemáticos utilizados em modelagem direta de dados de Polarização Induzida. Apresenta-se inicialmente a equação de Poisson, amplamente utilizada em pesquisa geoeletrica, pois permite determinar o potencial elétrico de uma região qualquer. Em seguida demonstram-se os procedimentos de discretização da equação de Poisson através do Método dos Elementos Finitos (MEF), objetivando simplificar a modelagem à resolução de um Sistema de Equações Lineares, culminando na construção da malha de elementos finitos e na obtenção dos dados finais. Por fim, serão apresentados métodos diretos e métodos iterativos como propostas para resolução deste Sistema de Equações Lineares. As demonstrações dos métodos e procedimentos a serem utilizados na modelagem 3D são detalhadas no decorrer deste capítulo.

3.2 – Modelagem direta 3D.

Em modelagem geoeletrica 3D, a resistividade aparente da região analisada por meio de uma determinada configuração de eletrodos será utilizada como base para a criação do modelo matemático que permita simular a estrutura geológica da região. Adota-se então que a região alvo do estudo pode ser representada por uma distribuição de resistividade 3D, e que a realização da modelagem geoeletrica consiste na resolução da equação de Poisson (abaixo) descrita no capítulo I:

$$\nabla \cdot [\sigma(x, y, z) \nabla V(x, y, z)] = -I \delta(x) \delta(y) \delta(z) \quad (1)$$

Onde;

$V(x, y, z)$ é o potencial elétrico;

$\sigma(x, y, z)$ é a condutividade do meio;

I é a intensidade da corrente;

δ é definida como função impulso.

3.2.1 – Solução por elementos finitos

Nesta modelagem faremos uso da equação de Poisson (1) para determinar o potencial elétrico de um meio qualquer (neste caso um meio 3D). A forma variacional da equação (1) é expressa por:

$$\int_{\Omega} W \left\{ -\nabla \cdot \left[\sigma(x, y, z) \nabla \mathcal{V}(x, y, z) \right] - I \delta(x) \delta(y) \delta(z) \right\} d\Omega = 0 \quad (2)$$

Com W sendo uma função teste (ou função peso) pertencente ao espaço de Hilbert $H^1(\Omega)$.

Para se obter termos com somente derivadas parciais de primeira ordem, o integrando da equação (2) será reduzido utilizando-se a seguinte identidade:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \{ (W \sigma \nabla \mathcal{V}) \} = \sigma \nabla \cdot \nabla \mathcal{V} + W \nabla \cdot (\sigma \nabla \mathcal{V}) \\ \text{ou} \\ W \nabla \cdot (\sigma \nabla \mathcal{V}) = \nabla \cdot (W \sigma \nabla \mathcal{V}) - \sigma \nabla \cdot \nabla \mathcal{V} \end{array} \right. \quad (3)$$

Fazendo a substituição da identidade (3) na equação(2), teremos:

$$\int_{\Omega} \sigma \nabla \cdot \nabla \mathcal{V} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\sigma W \nabla \mathcal{V}) d\Omega = \int_{\Omega} W I \delta(x - x_s) \delta(y - y_s) \delta(z - z_s) d\Omega \quad (4)$$

A segunda integral da equação (4) pode ser transformada em uma integral de contorno através do Teorema da Divergência (Capítulo 2), isto é,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\sigma W \nabla \mathcal{V}) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \sigma \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial n} W dT$$

onde $\partial\Omega$ refere-se ao contorno do domínio Ω e \mathbf{n} é o vetor unitário à região em questão.

Fazendo então a substituição da segunda integral na equação (4), temos

$$\int_{\Omega} \sigma \nabla \cdot \nabla \mathcal{V} d\Omega - \int_{\partial\Omega} \sigma \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial n} W dT = I W(x_s, y_s, z_s) \quad (5)$$

Para chegar à forma discretizada da equação (5) por elementos finitos da região compreendida, isto é, com o domínio Ω dividido em vários sub-domínios (como $\Omega = \sum_e \Omega_e$ e $\partial\Omega = \sum_e T_e$ por exemplo), utilizou-se o critério Galerkin (Becker et al., 1981), expresso a seguir:

$$V^e(x, y, z) = \sum_{i=1}^k V_i \Psi_i^e(x, y, z) \quad x, y \text{ e } z \in \Omega_e$$

onde o potencial é representado como uma combinação da função base $\Psi^e(x, y, z)$, e k representa o número total de funções base pertencentes ao domínio.

Considerando que a referida função teste (ou função peso) W em Ω_e expressa na equação é a mesma função base, ou seja,

$$W_i^e(x, y, z) = \Psi_i^e(x, y, z) \quad i = 1, \dots, k$$

Chegamos então na forma discretizada de (5) por elementos finitos, representada por:

$$\sum_e \left\{ \sum_{i=1}^k \left[\int_{\Omega^e} \sigma^e (\nabla \Psi_j \cdot \nabla \Psi_i) d\Omega^e \right] V_i + \sum_{i=1}^k \left[\int_{\partial\Omega^e} \sigma^e \left(\Psi_j \frac{\partial \Psi_i}{\partial n} \right) dT^e \right] V_i \right\} = I \Psi_j(x_s, y_s, z_s) \quad (6)$$

A expressão (5) também poderá ser representada na seguinte forma matricial:

$$\mathbf{M}\mathbf{V} = \mathbf{b} \quad (7)$$

onde \mathbf{V} é o vetor potencial, \mathbf{b} é o vetor fonte com somente 01 (um) elemento diferente de zero localizado na posição do eletrodo de corrente, e \mathbf{M} representa a matriz $N \times N$ construída a partir das matrizes elementares, representada pela seguinte equação:

$$M_{ij}^e = \sum_{i=1}^k \left[\int_{\Omega^e} \sigma^e (\nabla \Psi_j \cdot \nabla \Psi_i) d\Omega^e \right] V_i + \sum_{i=1}^k \left[\int_{\partial\Omega^e} \sigma^e \left(\Psi_j \frac{\partial \Psi_i}{\partial n} \right) dT^e \right] V_i \quad j = 1, \dots, k \quad (8)$$

onde n representa o número de nós na malha de elementos finitos e \mathbf{M} é uma matriz elementar simétrica.

Uma vez que a função base a ser utilizada foi definida e que é conhecida a condutividade, considerada constante, de cada elemento da malha, faz-se uso da equação (8) para a obtenção da matriz elementar que possibilitará a construção da matriz global \mathbf{M} , composta pelas matrizes elementares.

A resolução do sistema de equações lineares possibilita a determinação do potencial em qualquer nó da malha de elementos finitos, demonstrando-se então que a modelagem direta de polarização induzida no domínio da frequência será realizada por meio da resolução de um sistema de equações lineares.

3.2.2 - Determinação da matriz elementar

Para determinação da matriz elementar, o domínio Ω será dividido em um determinado grupo de estruturas (subdomínios) denominados elementos (Ω^e), os quais podem principalmente ser na forma triangular ou quadrática (em problema 3-D, os elementos mais comuns de uso são o paralelepípedo e o tetraedro). Faz-se então a escolha de quais conjuntos de elementos que unidos formam a região de domínio Ω a ser analisada.

De acordo com Bing & Greenhalh(2001) o método dos elementos finitos é computacionalmente mais eficiente e preciso, pois necessita de menor espaço em memória quando se aplica, por exemplo, como elemento o tetraedro.

Em estudos realizados anteriormente, observou-se a utilização de até dois tipos de elementos para a constituição do domínio Ω , como o de Sasaki(1994), que utilizou um esquema na discretização da região em que o domínio Ω é dividido em paralelepípedos, os quais são formados pela justaposição de 05(cinco) tetraedros. Bing & Greenhalh(2001) apresentaram outro esquema em que cada paralelepípedo que compõe o domínio é formado por 06 (seis) tetraedros.

Assim como no trabalho de Farias(2004), neste trabalho será adotado o esquema proposto por Bing & Greenhagh(2001) na construção da malha de elementos finitos para a modelagem 3D.

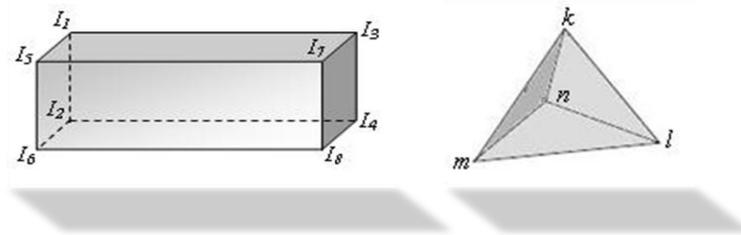


Figura 3.1: Tetraedro e paralelepípedo

A Figura 3.1. mostra a representação do esquema de Bing & Greenhalgh (2001), no qual os seis tetraedros são formados a partir dos nós do paralelepípedo, realizando as seguintes combinações: (I₁, I₂, I₃, I₅), (I₂, I₃, I₅, I₆), (I₃, I₅, I₆, I₇), (I₂, I₃, I₄, I₆), (I₃, I₄, I₆, I₇) e (I₄, I₆, I₇, I₈).

Tomando as funções base da forma linear, tem-se:

$$\Psi_j(x, y, z) = \frac{1}{6V_e} (a_j + b_jx + c_jy + d_jz) \quad j = 1,2,3,4 \quad (9)$$

onde V_e é o volume do tetraedro e a_j , b_j , c_j e d_j são constantes as quais são obtidas das coordenadas (x_j, y_j, z_j) . Tecnicamente, o determinante abaixo é seis vezes o volume do tetraedro.

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}$$

As expressões para as constantes a_j , b_j , c_j e d_j são relativamente grandes. Assim, expressa-se abaixo apenas as equações para uma das funções:

$$\begin{aligned} a_1 &= [x_2(y_4z_3 - y_3z_4) + x_3(y_2z_4 - y_4z_2) + x_4(y_3z_2 - y_2z_3)] \\ b_1 &= (y_3z_4 - y_4z_3) + (y_4z_2 - y_2z_4) + (y_2z_3 - y_3z_2) \\ c_1 &= (x_4z_3 - x_3z_4) + (x_2z_4 - x_4z_2) + (x_3z_2 - x_4z_2) \\ d_1 &= (x_3y_4 - x_4y_3) + (x_4y_2 - x_2y_4) + (x_2y_3 - x_3y_2) \end{aligned}$$

A solução da primeira integral de (8) será dada por:

$$\int_{\Omega^e} \sigma^e (\nabla \Psi_j \cdot \nabla \Psi_i) d\Omega^e = \frac{\sigma^*}{36V_e} (b_i b_j + c_i c_l + d_i d_j) \quad (10)$$

3.2.3 - Condições de contorno

Na formulação deste trabalho foram usadas duas condições de contorno:

- a) Inicialmente temos na superfície interface terra-ar caracterizando um meio condutivo limitado por um meio isolante. Sendo assim, não existirá fluxo de corrente nesta interface. Este efeito é descrito pela condição de Neumann:

$$\frac{\partial V}{\partial n} = 0$$

Em elementos finitos esta condição é implementada pela simples eliminação do seguinte termo da equação (8), para todos pontos pertencentes ao contato em questão

$$\int_{\partial \mathcal{E}^e} \sigma^e \left(\Psi_j \frac{\partial \Psi_i}{\partial n} \right) dT^e$$

- b) Na situação seguinte o meio condutivo será estendido para o infinito através do aumento gradativo dos elementos laterais e inferiores da malha de elementos finitos, simulando o crescimento do meio para o “infinito”, em seguida aplica-se a condição de Dirichlet, ou seja,

$$\mathbf{V} = \mathbf{0}$$

Esta condição é introduzida na formulação descrita acima por meio da atribuição de grandes valores para os elementos da matriz global M (equação 7), e do valor zero aos termos da fonte correspondentes aos nós das fronteiras.

3.2.4 - Solução do Sistema de Equações Lineares

A solução do sistema de equações lineares (7) corresponde à etapa final na aplicação do método dos elementos finitos. Faz-se então algumas observações sobre a matriz global M.

- a) O vetor V da equação (7) é formado pelos potenciais que se deseja obter nos nós da malha de elementos finitos;
- b) O vetor b é formado pelos elementos localizados a partir da fonte de corrente. A matriz M então será denominada matriz condutância.

Sabendo-se que as matrizes elementares que compõem a matriz global são simétricas, então a matriz M também será simétrica e os seus elementos serão obtidos pelo acoplamento próximos e que não existe acoplamento entre nós distantes. Logo, os coeficientes da matriz M referentes aos nós distantes serão nulos, tornando a matriz esparsa.

Neste trabalho adotaremos as mesmas condições de contorno de Farias(2004), com vista preservar a simetria e a esparsidade da matriz Condutância.

A figura 3.2 mostra o padrão de esparsidade de M para uma malha com $5 \times 5 \times 3$ nós. Observa-se nesta ilustração que a matriz M possui 15 diagonais (diagonal principal e 14 co-diagonais) contendo elementos não nulos.

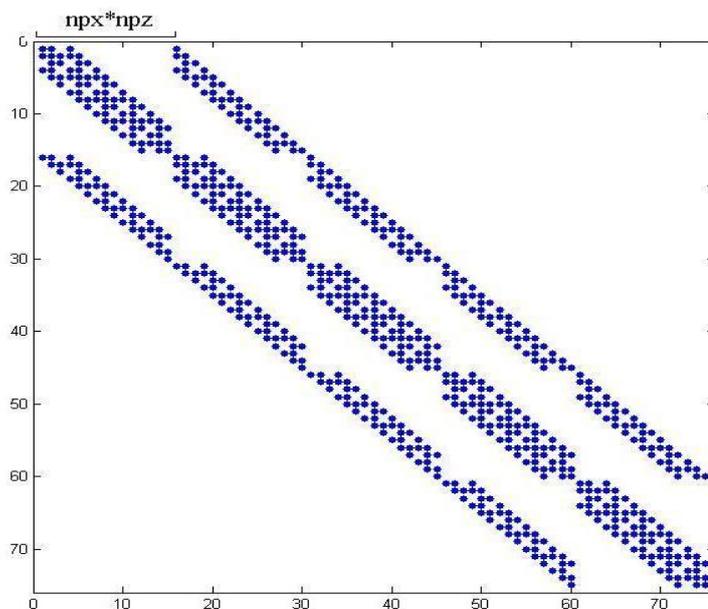


Figura 3.2 – Padrão de esparsidade da matriz M para uma malha $5 \times 5 \times 3$ nós (Farias, 2004)

Considerando-se que a matriz condutância M representada pela Figura 3.2 é esparsa e simétrica, precisaremos então armazenar somente oito diagonais, o que faz com que esta configuração seja extremamente vantajosa em termos computacionais, pois reduz consideravelmente o tamanho do espaço em memória necessário para armazenar os valores contidos nas coordenadas da matriz M .

Um exemplo de esquema de armazenamento eficiente para os dados de uma matriz é o adotado por Farias(2004), no qual apenas as diagonais com elementos não nulos são armazenados, conforme adotado como exemplo na montagem da matriz M para a malha de 5 x 5 x 3 nós, mostrada na Figura 3.2 de exemplo 5 x 5 x3.

Em modelagem computacional, os recursos de hardware e software disponíveis para a resolução de sistemas de equações lineares é de grande importância, pois de acordo com a característica do recurso disponível podem ser utilizados métodos diretos ou métodos iterativos.

Exemplos de métodos utilizados em modelagem computacional são o de **decomposição LU** (método direto) e o **método do bi-gradiente conjugado pré-condicionado** (método iterativo), descritos a seguir:

3.2.4.1 - Método de decomposição LU

O método de decomposição LU (ou fatoração LU) é utilizado para resolução de um sistema linear $MV=b$, conforme descrito em (7), e consiste na decomposição da matriz M em um produto de matrizes L e U, então é resolvida uma seqüência de sistemas lineares triangulares de modo a se obter a solução do sistema linear original.

$$\mathbf{M}=\mathbf{LU} \quad (11)$$

Consideramos que L é uma matriz triangular inferior com a diagonal unitária e que U é a matriz triangular superior e que os fatores L e U possuem a mesma largura que a matriz M. Dessa forma, ao substituírmos (11) em (7), o sistema linear $MV = b$ pode ser escrito como:

$$(\mathbf{LU})\mathbf{V} = \mathbf{b}$$

ou na forma

$$\mathbf{L}(\mathbf{UV}) = \mathbf{b}.$$

Uma vez que a decomposição triangular $M = LU$ é conhecida, a solução do sistema $MV = b$ é encontrada em dois passos: Primeiro resolvemos $Ly = b$, onde y é o vetor ou variável auxiliar a ser encontrado. Depois resolvemos $UV = y$. Ou seja, para encontrarmos a matriz (ou vetor) V que é a solução do sistema linear original devemos resolver os sistemas:

$$L.y = b \quad (12)$$

$$U.V = y \quad (13)$$

Sendo assim, resolveremos dois sistemas triangulares: um inferior (12), e posteriormente um superior (13). Estes sistemas são facilmente resolvidos através de substituição regressiva e progressiva, respectivamente.

Uma condição suficiente para aplicar o método de decomposição LU, é que o determinante da matriz, seja diferente de zero. Neste método observa-se que para calcular o potencial de cada eletrodo usado no arranjo, o processo de repetição (recursividade) ocorre apenas nas substituições progressiva e regressiva, fazendo desta característica o maior atrativo de se trabalhar com este método pois contribui para a redução do tempo de resposta na modelagem direta.

Sua principal desvantagem está no fato de demandar grande espaço de memória para o armazenamento dos fatores L e U do sistema linear, tornando a modelagem dependente da configuração de memória para poder executar.

3.2.4.2 – Método Iterativo do Gradiente Bi-Conjugado pré condicionado

De acordo com Weller et. al(1996), este método corresponde a uma implementação para que o método do gradiente conjugado pudesse ser aplicado em sistemas com matriz indefinida e que contenha elementos complexos em seus coeficientes, generalizando então o método do gradiente conjugado original, adequado a sistemas lineares em que a matriz dos coeficientes é real, simétrica, positiva definida.

O princípio básico do pré-condicionador é realizar a multiplicação da matriz $\bar{\mathbf{M}}^{-1}$ (a matriz $\bar{\mathbf{M}}$ é denominada de pré-condicionador) pelo sistema linear (7) de maneira que a matriz dos coeficientes resultante possua maior aproximação da matriz identidade

$$(\bar{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{M} \approx \mathbf{I} \text{ ou } \bar{\mathbf{M}}^{-1} \approx \mathbf{M}).$$

Para o método do gradiente bi-conjugado, utilizam-se os vetores:

$$r_k, \bar{r}_k, p_k, \bar{p}_k \text{ e } z_k, \bar{z}_k \quad (k = 1, 2, 3, \dots) \quad (14)$$

Atribui-se então um vetor inicial para r_1 e \bar{r}_1 e aplica-se a igualdade

$$p_1 = r_1 \text{ e } \bar{p}_1 = \bar{r}_1 \quad (15)$$

para em seguida realizar a seguinte recorrência

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\mathbf{M}} \cdot z_k &= r_k \\ \tilde{\mathbf{M}}^H \cdot \bar{z}_k &= \bar{r}_k \\ \alpha_k &= \frac{\bar{r}_k \cdot z_k}{p_k \cdot \mathbf{M} \cdot p_k} \\ \beta_k &= \frac{\bar{r}_{k+1} \cdot z_{k+1}}{r_k \cdot z_k} \\ p_{k+1} &= z_{k+1} + \beta_k p_k \\ \bar{p}_{k+1} &= \bar{z}_{k+1} + \beta_k \bar{p}_k \\ \tilde{\mathbf{V}}_{k+1} &= \tilde{\mathbf{V}}_k + \alpha_k p_k \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Neste trabalho utiliza-se o pré-condicionamento SSOR (*Symmetric Successive Over-Relaxation*), cuja matriz pré-condicionadora SSOR, conforme Farias(2004), é dada pela forma fatorada:

$$\tilde{\mathbf{M}} = (\mathbf{D} + w\mathbf{E})(\mathbf{I} + w\mathbf{D}^{-1}\mathbf{E}^T)$$

Onde

D: matriz diagonal (principal) de *M*

E: matriz triangular inferior de *M*

w: parâmetro de relaxação

A malha de elementos finitos usada neste trabalho para a modelagem 3D foi constituída de 107 x 107 x 31 nós, perfazendo uma matriz condutância de ordem 354919 x 354919.

Dependendo do recurso computacional (principalmente processador e memória) utilizado na modelagem, resolver um sistema linear dessa magnitude pode ser computacionalmente inviável, visto a grande necessidade de memória para armazenamento da matriz cujos coeficientes são complexos.

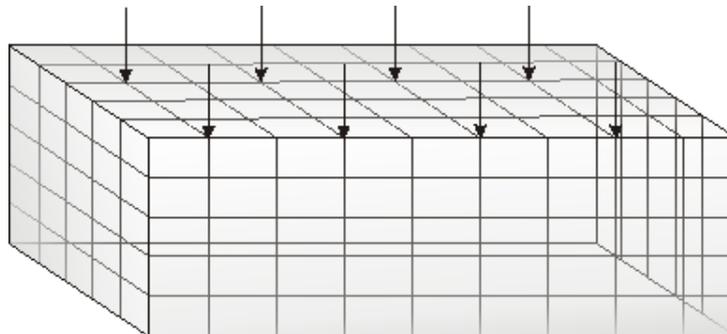


Figura 3.3 – Exemplo da malha de elementos finitos com os eletrodos e o número de nós.

Na investigação geolétrica com vários eletrodos é mais conveniente determinar o potencial de forma seqüencial, ou seja, determina-se o potencial para o primeiro eletrodo, em seguida o potencial para o segundo e assim sucessivamente.

A decomposição **LU** independe da localização do eletrodo, pois é realizada uma única vez sobre a matriz condutância **M**, possibilitando então a execução do cálculo do potencial dos eletrodos usados no arranjo com pouca recursividade (processos de repetição), ocorrendo apenas nas substituições progressiva e regressiva. Esta característica é um dos atrativos deste método, pois reduz o tempo de resposta na modelagem direta. Em contraponto, o método necessita de grande espaço em memória para o armazenamento dos fatores **L** e **U** do sistema linear, tornando a modelagem dependente da configuração de memória para poder executar.

CAPÍTULO 4

COMPUTAÇÃO PARALELA: CONCEITOS E APLICAÇÕES.

4.1 – Introdução

O contínuo avanço das tecnologias de hardware e software tem contribuído de forma considerável para o também crescente desenvolvimento das pesquisas nas áreas das ciências naturais e engenharias. Observa-se então o surgimento de novas aplicações que demandam uma capacidade computacional cada vez maior para a execução de tarefas envolvendo problemas com alto grau de complexidade, apresentando soluções precisas dentro de intervalo de tempo satisfatório.

Neste contexto, a construção de máquinas com arquitetura paralela surge como uma alternativa para suprir esta necessidade de um maior desempenho computacional para a realização destas aplicações com um custo operacional relativamente mais barato se comparado ao de um supercomputador.

Neste trabalho definimos por máquina paralela a uma arquitetura composta por um conjunto (agregado) de computadores denominado de *cluster*, em que o processamento dos dados pertencentes a uma determinada aplicação é realizado simultaneamente entre os múltiplos processadores que compõem esta estrutura visando reduzir o tempo de sua execução. Para viabilizar este processamento, faz-se necessário também o uso de Sistema Operacional capaz de suportar e de gerenciar esses processadores, assim de como aplicações que explorem essa forma de paralelismo.

Este Capítulo apresenta alguns conceitos básicos referente a processamento paralelo como as arquiteturas de computadores paralelos, modelos e métodos e bibliotecas utilizados no desenvolvimento de aplicações paralelas, assim como padrões de programação paralela.

4.2. Arquiteturas paralelas

Os modelos de arquiteturas de computadores podem ser caracterizados segundo Flynn(1972) de acordo com dois critérios básicos:

- Número de fluxo de dados;
- Fluxo de instruções.

Conforme estes critérios, temos a seguinte classificação de computadores (Buyya, 1999; Pitanga, 2008):

a) SISD (*single instruction stream, single data stream*)

Neste modelo os dados e instruções são processados de forma seqüencial e sob a responsabilidade de apenas um processador, inexistindo qualquer execução paralela.

b) MISD (*multiple instruction stream, single data stream*)

Modelo em que um mesmo dado é utilizado na execução de várias instruções, as quais podem ser distribuídas entre os processadores que compõem o sistema e executadas simultaneamente.

c) SIMD (*single instruction, multiple data*)

Uma mesma instrução é executada de forma paralela pelos processadores pertencentes ao modelo, utilizando dados distintos

d) MIMD (*multiple-instruction stream multiple-data stream*)

Neste modelo cada processador age de forma independente pois executa seu próprio conjunto de instruções e possui seu próprio conjunto de instruções. Estas máquinas podem fazer uso da memória de forma compartilhada (os processadores podem endereçar toda a área de memória do modelo), ou distribuída (cada processador pode endereçar apenas um trecho específico, exclusivo para seu uso).

4.3. Sistema com Múltiplos Processadores

Podemos classificar a arquitetura de um sistema composto por múltiplos processadores de acordo com o grau de acoplamento existente entre os mesmos em *Sistemas fortemente acoplados* e *sistemas fracamente acoplados* (Tanenbaum, 2003; Machado, 2007) .

4.3.1. Sistemas Fortemente acoplados:

Nesta arquitetura fica evidente o alto grau de interação e interdependência entre os processadores, pois os mesmos estão dispostos em um mesmo circuito (placa mãe), utilizando de forma compartilhada a mesma memória e sendo gerenciados pelo mesmo Sistema Operacional.

O processamento das instruções pode ser feito de forma *simétrica*, em que todos processadores podem executar a mesma instrução em iguais condições permitindo um melhor balanceamento de carga de trabalho, ou de forma *assimétrica*, onde há a existência de uma relação de inter-dependência entre os processadores pois nesta arquitetura a distribuição de execução das instruções é auxiliada por um processador “mestre” de acordo com a demanda existente possibilitando com isso um melhor gerenciamento da aplicação executada mas tornando o Sistema mais vulnerável a falhas pelo fato de existir uma hierarquia que condiciona o a execução de um processador em função de outro (relação mestre-escravo).

4.3.2. Sistemas Fracamente acoplados.

Estes sistemas caracterizam-se por possuírem dois ou mais sistemas computacionais conectados por meio de linhas (links) de comunicação onde cada sistema funciona de forma independente, possuem seu próprio Sistema operacional e gerenciam seus próprios recursos computacionais (processador, memória, discos). Devido as características de gerenciamento dos seus Sistemas Operacionais, podemos classificar esta arquitetura de sistema em: Sistemas de Rede e Sistemas distribuídos (Machado, 2007).

Os Sistemas Operacionais Rede permitem que um computador (também chamado host) compartilhe seus recursos (como impressora, discos) com os demais computadores da rede.

Os Sistemas Distribuídos também possuem mesmas características que os sistemas de rede, porém ao contrário do que acontece aos os sistemas de rede estes sistemas ocultam os detalhes dos hosts individuais e trata-os como sendo uma estrutura única, isto é, como se todo o conjunto correspondesse a uma única máquina, similar a um sistema fortemente acoplado. Esta característica possibilita que uma aplicação seja dividida em partes e que cada parte seja executada em um host diferente, dando a impressão ao usuário que esta aplicação está sendo executada por uma única máquina.

4.4. Clusters

É um exemplo de Sistema Fracamente Acoplado e caracteriza-se em ser composto por um conjunto de nós (computadores) conectados por uma rede de interconexão de alto desempenho e dedicada (Tanenbaum, 2001; Buyya, 1999; Pitanga, 2008).

Cada nó da rede é denominado membro do cluster e possuem seus próprios recursos como processador, espaço de endereçamento individual (memória), e dispositivo(s) de E/S, porém estes recursos são amplamente compartilhados entre todos os membros do cluster quando é necessário.

A comunicação entre os membros se faz, na maioria das implementações, por meio de mecanismos (protocolos) de troca de mensagem através da rede, existindo atualmente diversos padrões (FDDI, Fibre Channell, ATM, Gigabit Ethernet).

Atualmente os clusters são utilizados em vários fins como: Servidores WEB, Sistemas de e-commerce, Servidores de banco de dados (backups e espelhamento de discos), soluções em segurança serviços para a internet (Servidores, firewall).

Os motivos iniciais do surgimento dos primeiros clusters assim como sua rápida aceitação partiram da necessidade de tolerância a falhas e da alta disponibilidade, objetivando reduzir ao máximo o tempo de parada do sistema (downtime) em decorrência de problemas com alguns de seus membros.

4.5. Tipos de cluster

A finalidade na qual será empregado e a arquitetura de hardware e software utilizada na construção de um cluster são referências importantes para a escolha do tipo de cluster.

Conforme a finalidade ao qual venha a ser utilizado, podemos classificar clusters em: Cluster de alta Disponibilidade, cluster de balanceamento de carga e cluster de alto desempenho (Pitanga, 2008).

4.5.1. Cluster de Alta Disponibilidade (High Availability - HA)

São máquinas construídas tendo como referência o princípio de tolerância a falhas e redundância de hardware, possibilitando que o sistema se mantenha funcionando de forma ininterrupta, pois mesmo que um de seus componentes venha a sofrer alguma pane os demais componentes assumirão a execução das aplicações e serviços do computador danificado já que possuem o espelho dos dados gerenciados por este. São utilizados em aplicações de banco de dados e servidores de arquivos, por exemplo.

4.5.2. Cluster de balanceamento de carga (Load Balancing)

Todos os nós possuem os mesmos requisitos para a execução de aplicações assim como os mesmos programas, o que possibilita uma melhor distribuição da carga de trabalho entre os mesmos, pois todos os nós são responsáveis em controlar o tráfego das requisições do usuário, assumindo e compartilhando a execução de tarefas daqueles nós que venham a apresentar problemas. Utilizados em serviços para a WEB.

4.5.3. Cluster de alto desempenho:

Este modelo tem por princípio fundamental o aumento de performance computacional, similarmente ao de um supercomputador, visando diminuir o tempo de resposta no processamento de aplicações de alta complexidade. A execução de uma determinada tarefa de alta complexidade é dividida em aplicações menores e distribuída entre todos os nós do modelo. São utilizados em aplicações científicas e financeiras.

Levando em consideração a arquitetura de hardware dos nós (computadores) componentes do cluster, podemos classificá-los conforme a seguir:

4.5.3.1. Arquitetura de Cluster de estações de trabalho (Workstation)

Um cluster de workstation é um conjunto de computadores completos (com teclado, monitor, mouse), conectados em rede, que podem executar as funções de computador para uso diário, pois possuem diversos tipos de programas de usuário (como processadores de texto e planilhas); e realização do uso para processamento paralelo pesado na ocasião em que for solicitado (pode ser usado para esses fins ao final do dia ou nos fins de semana por exemplo).

Requisitos: Máquinas devem ser completas e independentes. Requer o uso de uma biblioteca de troca de mensagens como PVM ou MPI.

Vantagens: Possibilita o uso das máquinas por diferentes usuários para realização de suas tarefas rotineiras.

Desvantagens: Devido a possibilidade de utilização para fins além daqueles ao qual foi estruturado (processamento paralelo), seu desempenho pode ser reduzido pois em determinado momento podemos ter vários usuários utilizando os processadores para outras tarefas. Na prática reduz o uso do cluster a ocasiões em que outros usuários não estejam utilizando. Tem um custo maior por máquina e requer manutenção constante.

4.5.3.2. Arquitetura de Cluster Beowulf

O cluster Beowulf corresponde a uma tecnologia de cluster formado por computadores agrupados em rede e trabalhando com o Sistema operacional GNU/Linux para formar um supercomputador virtual via processamento paralelo (distribuído).

Requisitos: Conjunto de computadores interligados por uma rede de alta velocidade, onde somente uma máquina (servidor) possuirá teclado, monitor e mouse construídos exclusivamente para a realização/utilização em processamento paralelo. Para que os nós possam se comunicar, requerem o uso de uma biblioteca para troca de mensagens como PVM ou MPI.

Vantagens: Manutenção facilitada, redução do número de problemas ocasionados pela instalação de pacotes desnecessários. Menor custo das máquinas e de manutenção.

Desvantagens: Devido a finalidade para a qual foi construído, as máquinas tem seu uso limitado ao processamento definido pelo servidor.

4.5.3.3. Arquitetura de Cluster MOSIX

MOSIX é um adendo ao kernel do GNU/LINUX adicionado de funcionalidades de computação com cluster. Possibilitando que as estações do cluster, baseadas em X86/Pentium/AMD, trabalhem de forma cooperativa, como sendo um único sistema. A migração dos processos entre as várias máquinas do cluster é automática. Isso permite que programas antigos funcionem num ambiente de cluster com pouquíssimas alterações.

Características do MOSIX: Balanceamento dinâmico e inteligente de carga, uso como cluster heterogêneo, transparência, escalabilidade, descentralização e autonomia dos nós. Migração preemptiva dos processos com uso de algoritmos probabilísticos. Comunicação entre núcleos eficiente, controle descentralizado,

Requisitos: Requer a recompilação do kernel com a inclusão do Mosix ou instalação de kernel em pacote (como os pacotes rpm do GNU/Linux/RedHat). O site do Mosix apresenta informações detalhadas de como instalar o Mosix.

Vantagens: O trabalho de programação é reduzido, exigindo apenas a implementação dos mecanismos de troca de mensagens entre os diferentes processos. Otimização do uso das máquinas do cluster com a migração automática dos processos.

Desvantagens: Exige a recompilação do kernel.

4.6. Bibliotecas para desenvolvimento de programas usando processamento paralelo.

Segundo Pitanga(2008), as aplicações destinadas ao uso por processamento paralelo podem ser desenvolvidas por meio de recursos como: processos, threads, sistemas de troca de mensagens (PVM, MPI). Os dois padrões de referência para a troca de mensagem entre os componentes de um cluster são: *Parallel Virtual Machine* (PVM) e o *Message Passing Interface* (MPI) para as quais serão comentadas com mais detalhes a seguir.

O PVM é o padrão mais antigo, é realmente o nome de uma biblioteca. O MPI corresponde a uma evolução do PVM, sendo a novidade no que se refere a tecnologias de software em processamento paralelo. É um padrão com várias implementações criadas principalmente por universidades e algumas suportadas comercialmente por empresas

4.6.1. PVM (Parallel Virtual Machine)

Primeira biblioteca desenvolvida para uso em processamento em ambiente paralelo e/ou distribuído, através de troca de mensagens entre os nós. É o padrão de fato da indústria de software.

O PVM se baseia em duas primitivas básicas:

- i) envie mensagem
- ii) receba mensagem.

É de fácil utilização, porém não tão poderoso se comparado com o MPI. O usuário deve configurar as máquinas para que seja o mais idêntica possível, facilitando a manutenção e estabelecendo uma relação de confiança entre elas. Usar **rhosts** e **rsh** é a forma mais simples de conseguir isso. O usuário roda o gerenciador do PVM, adiciona máquinas ao cluster e depois simplesmente executa o programa feito usando as bibliotecas PVM.

Requisitos: Para o desenvolvimento dos programas é necessário conhecer a biblioteca PVM. É um sistema explícito, ou seja, cabe ao programador dividir as tarefas através da troca de mensagens.

Vantagens: Possibilita o uso do processamento distribuído. É o mais utilizado. Alguns programas de engenharia e matemática geram código automaticamente para o PVM.

Desvantagens: Não é mais o padrão. O desenvolvimento dos programas fica bem mais complicado quando comparado com threads.

4.6.2. MPI (Message Passing Interface)

O padrão MPI é uma biblioteca desenvolvida para ser padrão em ambientes de memória distribuída usando troca de mensagens. O objetivo do MPI é simplesmente estabelecer um padrão para programar usando troca de mensagens tornando o programa mais portátil, eficiente e flexível

É um método que inclui conceitos novos como rank (cada processo tem uma identificação única, crescente), group (conjunto ordenado de processos) e communicator (uma coleção de grupos), que permitem um gerenciamento mais complexo (e inteligente) do uso de cada máquina do cluster.

O MPI tem opções mais avançadas (que o PVM), como envio de mensagens broadcast (para todas as máquinas do cluster) e multicast (para um grupo específico de máquinas), assim como um melhor controle sobre o tratamento que cada mensagem terá ao ser recebida por outro ponto do cluster. A configuração do MPI depende da implementação utilizada e algumas delas chegam a instalar front-ends para compiladores em C e Fortran, mas a forma geral de uso é semelhante.

Os programas implementados com MPI somente podem ser executados usando essas bibliotecas, mesmo utilizando apenas um processador. Todo o paralelismo é explícito, o programador é o responsável em identificar o paralelismo e implementar um algoritmo utilizando construções com o MPI. A decomposição de domínios é explicitada pelo programador e cada processo é responsável pelo seu conjunto de dados. Conseqüentemente o balanceamento de carga também é explícito

Requisitos: Requer o conhecimento de um sistema bastante complexo de troca de mensagens, o MPI. É um método explícito.

Vantagens: É o novo padrão para processamento distribuído, e atualmente tem sido utilizado tanto quanto o PVM.

Desvantagens: Na prática significa aprender uma nova linguagem de programação. É um padrão da indústria com várias implementações individuais.

CAPÍTULO 5

PROCEDIMENTO PARA INTERPRETAÇÃO DE DADOS DE POLARIZAÇÃO INDUZIDA – MODELAGEM DIRETA

5.1 – Introdução

Neste capítulo serão apresentados os procedimentos aplicados para a interpretação de dados de polarização induzida no domínio da frequência, aplicando o modelo fractal para a resistividade complexa com o intuito de buscar a discriminação dos meios geológicos.

A metodologia aplicada corresponde à modelagem sintética em 3D, voltada à aplicação do método de IP para detecção de possível contaminação do meio ambiente analisado por meio de agentes orgânicos e químicos. As modelagens realizadas têm como referência base os parâmetros do modelo fractal obtido por Rocha(1995) e os procedimentos de investigação realizados por Farias(2004).

5.2 – Procedimento de Interpretação

O procedimento de interpretação de dados de polarização induzida utilizado neste trabalho baseou-se em estudos de Farias(2004), e tem por objetivo a obtenção de uma imagem representativa da distribuição dos parâmetros do modelo fractal de resistividade complexa do meio investigado.

Tendo como base a descrição matemática da modelagem realizada no capítulo 02, podemos estruturar o processo de interpretação dos dados da modelagem IP por meio da seguinte lista de procedimento:

- Obtenção das medidas de resistividade complexa (amplitude a ângulo de fase) em várias frequências distintas;
- Montagem das pseudo-seções em cada frequência;
- Obtenção de parâmetros aparentes do modelo fractal a partir das medidas de resistividade complexa aparente;
- Divisão do meio em subdomínios (discretização do modelo geológico);
- Aplicação das condições de contorno;
- Determinação da matriz elementar;
- Solução do sistema de equações lineares;
- Geração da malha de elementos finitos;

5.3 – Aplicação do Procedimento em Modelagem 3D

A metodologia de interpretação de dados de polarização induzida foi aplicada especificamente em modelo sintético 3D a fim de obter imagem com uma resolução que mais se aproxime da real estrutura de um determinado corpo imerso na região analisada.

Com o objetivo de verificar a eficiência e a precisão da modelagem 3D por elementos finitos apresentada neste trabalho, foram realizadas simulações tendo como parâmetro os modelos fractal com uma (01) e duas (02) camadas. O resultado do modelo de duas camadas foi então comparado com a solução analítica do modelo de duas camadas polarizáveis apresentada em Rocha(1995). As resistividades complexas das camadas são dadas pelo modelo fractal cujos parâmetros são dados pelas Tabelas a seguir:

Tabela 5.1: Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa para uma camada.

	Parâmetros do modelo fractal					
	ρ_0 ($\Omega.m$)	M	δ_r	τ (μs)	τ_f (ms)	η
Camada 01	100	0,5	1,0	1,0	1,0	0,5

Onde, η → *índice (expoente) fractal*
 δ_r → *parâmetro fractal*
 m → *cargueabilidade*
 τ_f → *constante de tempo de relaxação fractal*

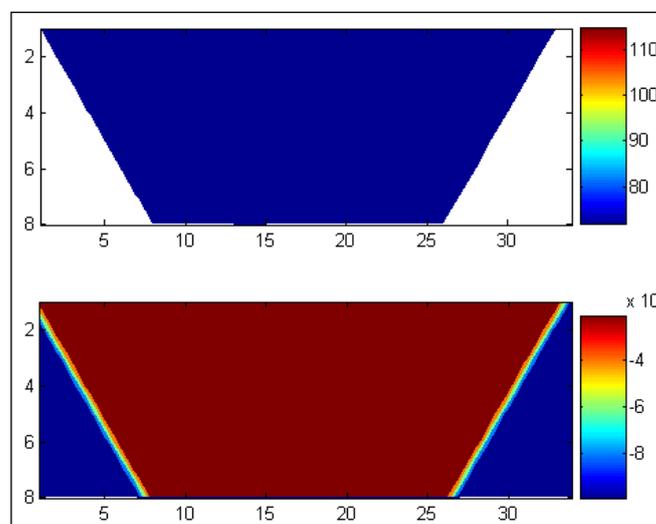


Figura 5.1 - Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa para uma camada.

Tabela 5.2: Parâmetros do modelo fractal de resistividade complexa para duas camadas.

	Parâmetros do modelo fractal					
	ρ_0 ($\Omega.m$)	M	δ_r	τ (μs)	τ_f (ms)	η
Camada 01	100	0,5	1,0	1,0	1,0	0,5
Camada 02	10	0,5	1,0	1,0	1,0	0,25

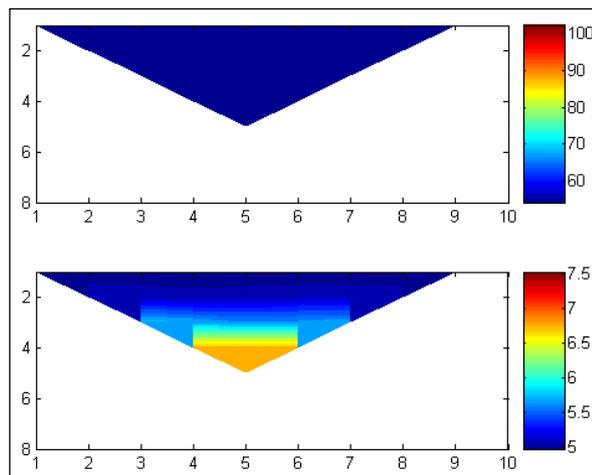


Figura 5.2 - Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa para duas camadas.

Para a simulação deste modelo comparativo, o arranjo de eletrodo utilizado foi o dipolo-dipolo com espaçamento entre os eletrodos de 2 m e o número de espaçamento foi oito. A espessura da primeira camada foi de 2 m. O programa da modelagem 3D foi executado pelo computador cuja especificação apresenta-se na tabela 5.3, com tempo de execução da simulação de 1h10min.

Tabela 5.3: Especificação do computador usado em processamento centralizado:

Processador	Intel Pentium Dual Core
Memória RAM	3GB DDR2
Disco rígido	250 GB
Sistema operacional	Windows XP Professional

A comparação entre as resposta analítica (Rocha, 1995) e por elementos finitos é mostrada na Figura 5.3. O erro máximo, tanto para a amplitude quanto ao o ângulo de fase foi menor que 1%.

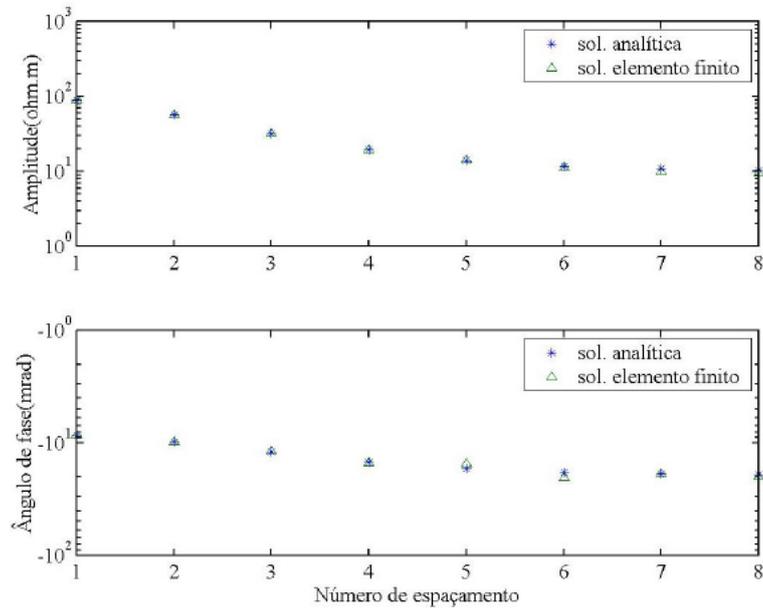


Figura 5.3 – Comparação entre a solução analítica e a solução por elementos finitos para o modelo com duas camadas

Para o experimento final, os dados e medidas foram gerados com a utilização de uma malha (M) de 107 x 107 x 31 nós, com região de investigação dada por 76 × 76 × 20, na qual foram utilizadas para a realização da sondagem o quantitativo de 20 eletrodos do tipo dipolo-dipolo com espaçamento entre os eletrodos de 2m e número de medidas por espaçamento (n-spacing) igual a 8, nos quais foram aplicados pulsos em 05 frequências logaritmicamente espaçadas entre 0,1 Hz e 64 Hz.

O modelo considerado foi de um corpo imerso em um semi-espaço homogêneo (Farias, 2004) sendo ambos os meios polarizáveis e apresentando resistividades complexas dadas pelo “modelo fractal”. Os meios são constituídos do mesmo material apresentado na amostra vnh-6 (Vanhala et. al, 1992), constituída por tilito não contaminado e tilito contaminado com óleo de motor com tempo de maturação de 24 dias, cujos parâmetros do modelo fractal são apresentados na conforme a Tabela 5.4

Tabela 5.4: Parâmetros do modelo fractal para resistividade complexa da amostra vnh-6

Amostra vnh-6	Parâmetros do modelo fractal					
	ρ_0 ($\Omega.m$)	M	δ_r	τ (μs)	τ_f (ms)	η
Não contaminada	5200	0,906	4,959	20,343	0,007	0,202
Contaminada com óleo de motor e tempo de maturação de 24 dias	1470	0,885	4,877	11,872	0,923	0,449

As dimensões da heterogeneidade foram $6 \times 6 \times 2$ m e sua profundidade de 1 m, ou seja, o corpo encontra-se a 1 m da superfície. A figura 5.4 ilustra o modelo geológico descrito acima.

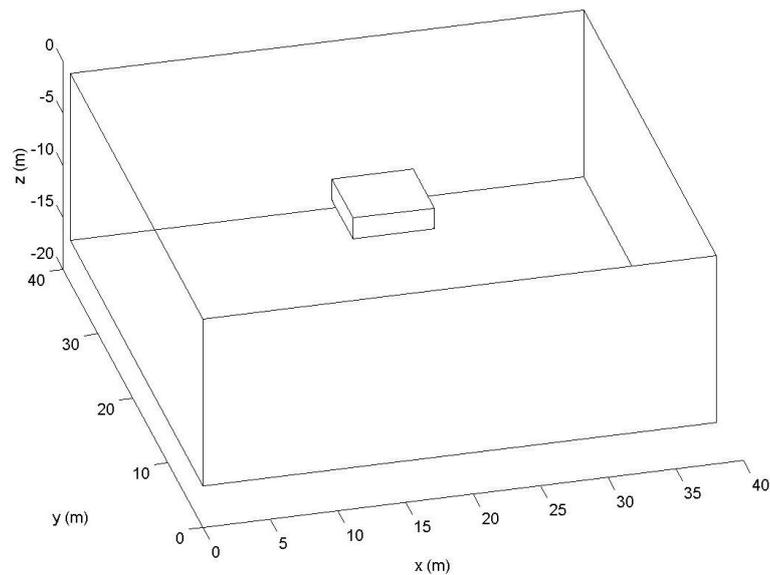


Figura 5.4 – Modelo 3D formado por paralelepípedo embebido em meio homogêneo, ambos polarizáveis com resistividade complexa dada pelo modelo fractal para resistividade complexa.

O perfil seleccionado localiza-se no centro ($y=20$ m), o qual se denominou de **perfil 1**, cujos resultados são apresentados a seguir em 5.3.1.

O tamanho da malha de elementos finitos (107 x 107 x 31) adotada para a modelagem 3D gerou uma matriz condutância gerada da ordem de 354919 x 354919, o que necessita de uma máquina com elevado poder computacional. No experimento de Farias (2004), o algoritmo de modelagem direta 3D escrito em linguagem de programação FORTRAN foi executado em um computador com Processador Pentium IV de 1,6GHz e 1GB de memória. Para a solução do sistema linear o método direto da decomposição LU não pôde ser utilizado visto que a quantidade de memória disponível inviabilizava o uso deste método.

Devido a esta dependência direta do recurso computacional, então limitado, foi utilizado na solução do sistema de equações o método iterativo do bi gradiente conjugado pré-condicionado na solução do sistema de equações lineares, possibilitando a execução algoritmo, mas que devido ao alto grau de recursividade (operações repetidas) executou a tarefa em aproximadamente 16 horas.

Esta limitação de recurso conseqüentemente tornou o procedimento de inversão 3D de Farias(2004) impraticável nestas condições e para atenuar essa dificuldade, realizou-se a modelagem direta 3D selecionando alguns perfis dessa modelagem para a aplicação da inversão 2-D.

Sobre o experimento de Farias(2004), observa-se as seguintes características:

- O modelo teve que sofrer alterações sensíveis decorrente das imitações dos recursos computacionais utilizados;
- O algoritmo criado possui maior complexidade em decorrência da limitação de recursos, ao que teve como conseqüência um maior tempo de resposta na obtenção dos dados para modelagem direta 3-D;
- Seria computacionalmente impraticável para a modelagem inversa caso não fossem adotadas artifícios matemáticos, o que acabou descaracterizando o modelo como sendo puramente 3D;

Com vista ao aperfeiçoamento do modelo de Farias(2004) foi realizado neste trabalho um estudo tendo como base a utilização recursos computacionais associados a modelagem matemática para a modelagem 3D que permitissem aproveitar ao máximo os recursos oferecidos pelas tecnologias de hardware e software existentes no momento.

A metodologia utilizada no trabalho envolve: análise dos métodos de resolução do sistema de equações lineares utilizados na discretização da equação de Poisson para a geração da malha de elementos finitos; atualização na plataforma de Software (Sistema operacional, algoritmo e linguagem de programação utilizada) e de hardware.

As ações realizadas estão expressas conforme a seguinte relação:

- i. Desenvolvimento dos algoritmos para a resolução do sistema de equações lineares através dos métodos do gradiente bi-conjugado pré-condicionado e do método de decomposição LU;
- ii. Utilização do Sistema Operacional Windows para realização de testes de processamento em ambiente serial;
- iii. Utilização do Sistema Operacional Linux para realização de testes de processamento em ambiente paralelo;
- iv. Utilização da linguagem FORTRAN no desenvolvimento dos algoritmos, com utilização da biblioteca MPI para suporte a processamento paralelo;
- v. Utilização de computador para a realização de processamento serial, com configuração expressa na tabela 4.3;
- vi. Criação de um Cluster de computadores com 03(três) máquinas para a realização de testes em ambiente paralelo, com especificação das máquinas conforme a tabela 4.4.

Tabela 5.5: Especificação dos computadores do cluster:

Descrição	Servidor
Processador	Intel Pentium Dual Core
Memória RAM	2GB DDR
Disco rígido	80 GB
Placa de rede	Ethernet 10/100
Sistema operacional	Linux, distribuição Fedora
Descrição	Comp01
Processador	Intel Pentium Dual Core
Memória RAM	1GB DDR
Disco rígido	80 GB
Placa de rede	Ethernet 10/100
Sistema operacional	Linux, distribuição Fedora
Descrição	Comp02
Processador	Intel Pentium Dual Core
Memória RAM	1GB DDR
Disco rígido	80 GB
Placa de rede	Ethernet 10/100
Sistema operacional	Linux, distribuição Fedora

5.3.1 – Obtenção dos Resultados - Modelagem do Perfil 1

Para o perfil 1, isto é, para uma sondagem no centro do corpo, as pseudo-seções são mostradas a seguir pela Figura 5.5. Nesta figura, são mostradas as pseudo-seções da resistividade complexa aparente na forma de amplitude (parte superior) e em ângulo de fase (parte inferior), As frequências utilizadas para o perfil 1 são:

- a) 0,1 Hz;
- b) 0,5030 Hz;
- c) 2,5298Hz;
- d) 12,7243 Hz
- e) 64 Hz.

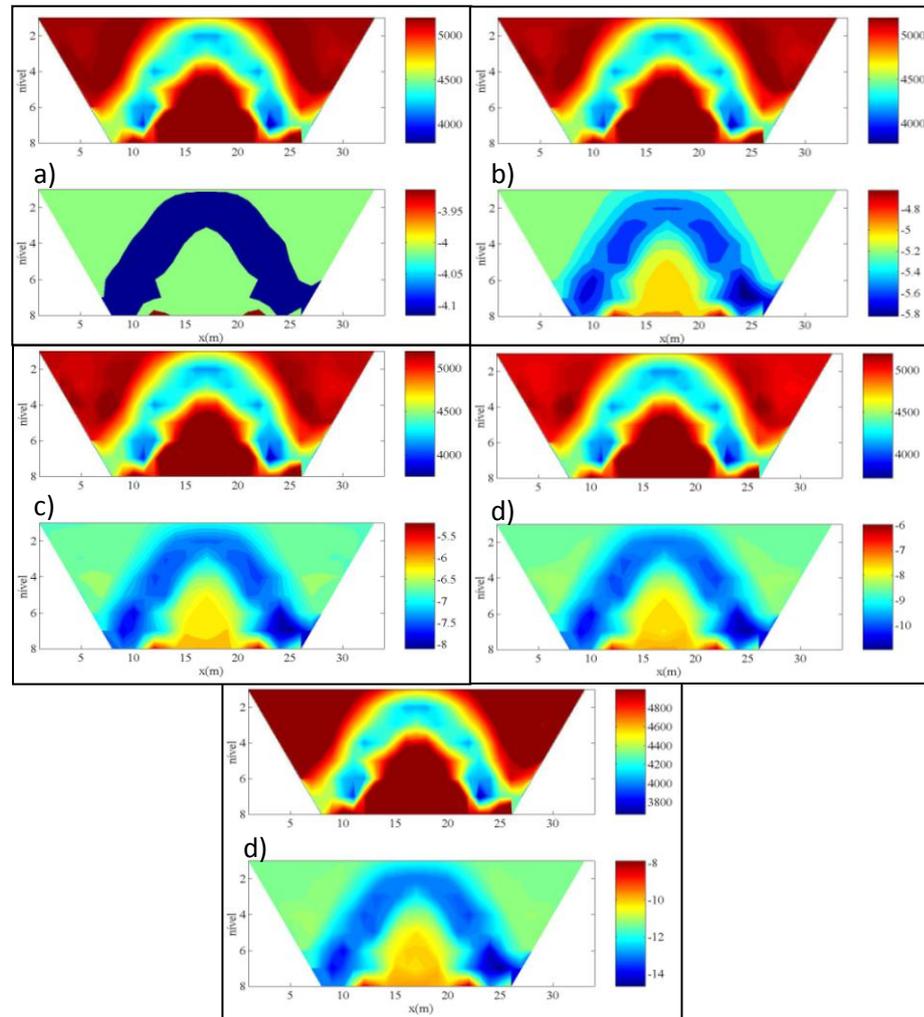


Figura 5.5 – Pseudo-seções da resistividade complexa aparente, na forma de amplitude (parte superior) e ângulo de fase (parte inferior).

5.3.2. Aplicação dos algoritmos de modelagem 3D

A modelagem de dados 3D desenvolvidos deste trabalho teve como referência algorítmica o modelo construído e implementado por Farias(2004). Foram desenvolvidos 02 (dois) algoritmos em linguagem FORTRAN, utilizados na resolução do sistema de equações lineares que serve de suporte para a montagem da malha de elementos finitos.

Inicialmente este trabalho consistia em criar algoritmos para resolução do sistema de equações lineares pelos métodos do gradiente bi-conjugado (iterativo) e o da decomposição LU (direto), executados tanto em ambiente serial (computador isolado descrito pela Tabela 5.3) quanto em ambiente paralelo (cluster formado por 03 computadores - ver Tabela 5.5), porém por questões de viabilidade de conclusão dos estudos dentro do previsto, foi dado maior ênfase ao método do gradiente bi-conjugado.

Para que os programas paralelos pudessem ser executados por todos os nós do cluster, foi utilizada a biblioteca MPI no escopo dos programas e implementada de forma que pudesse realizar as trocas de mensagens e de dados entre o servidor que contém o programa principal, e as máquinas clientes para que auxiliem no balanceamento da carga de processamento decorrente da complexidade dos dados processados pelo ambiente.

5.4. Verificação dos Resultados

O algoritmo de elementos finitos que realizava resolução do sistema linear pelo método iterativo do bi-gradiente conjugado foi realizado em ambos os ambientes, apresentando tempo de resposta de **6h50min** para o ambiente serial e aproximadamente **12h40min** em ambiente paralelo. Observou-se que em ambiente paralelo, embora tivesse ocorrido um ganho se comparado com o modelo de Farias(2004) o tempo de resposta ficou condicionado a um melhor refinamento dos processos de trocas de mensagem da biblioteca MPI e da velocidade de transmissão suportada pelo link de comunicação da rede. Estas condições atualmente estão sendo em desenvolvimento com vista a melhorar seu desempenho.

A Figura 5.6. ilustra o gráfico comparativo de desempenho dos modelos (serial e paralelo) com o modelo de Farias(2004), aplicando o método recursivo do bi-gradiente conjugado, e em seguida a representação dos dados encontrados.

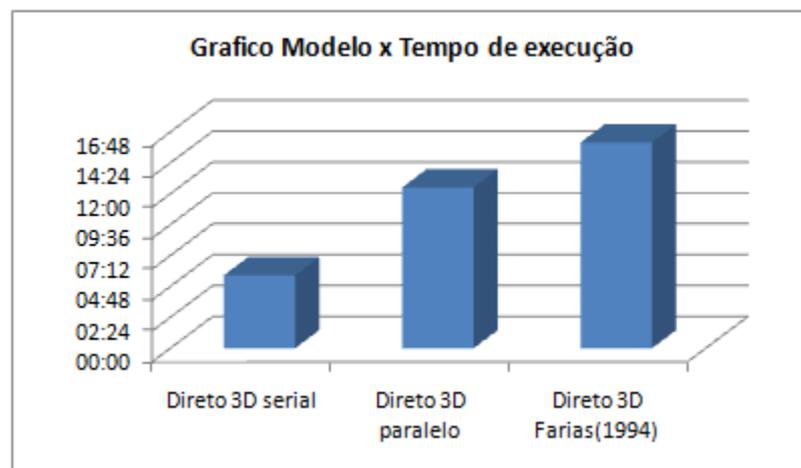


Figura 5.6 - Gráfico comparativo entre os modelos serial, paralelo e o de Farias (2004)

CONCLUSÃO

Após realização dos testes do algoritmo da modelagem direta 3D, observou-se observado uma considerável melhoria no tempo de resposta do modelo em relação ao modelo de Farias(2004). Em ambiente serial o ganho de desempenho foi de aproximadamente 65% enquanto que com o uso de cluster foi de aproximadamente 18%. Em relação ao desempenho em ambiente paralelo é válido ressaltar que o objetivo principal deste trabalho era encontrar condições que permitissem a realização da modelagem inversa de dados 3D de Polarização Induzida, tendo como referência a modelagem direta de dados 3D de Polarização Induzida, o que por intermédio da utilização tanto de tecnologias avançadas de hardware quanto de tecnologias alternativas (como o processamento paralelo em cluster) comprovou sua viabilidade computacional.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, ocorreram fatos importantes tanto na montagem e configuração do cluster quanto no desenvolvimento dos algoritmos utilizados na modelagem. Primeiramente na montagem do cluster ocorreu incompatibilidade entre hardware e software, pois as distribuições GNU/Linux que continham a biblioteca de computação paralela/distribuída não eram totalmente compatíveis com a arquitetura de hardware utilizada inicialmente, necessitando então da substituição do hardware utilizado inicialmente pela configuração mostrada na Tabela 5.5. Além do requisito de hardware necessário, foram realizados testes entre 05 distribuições do Sistema Operacional LINUX, em duas versões de cada distribuição, objetivando encontrar qual aquela que melhor se adaptava ao hardware utilizado.

Os algoritmos inicialmente desenvolvidos linguagem C apresentaram inconsistências em sua execução decorrente do tamanho e precisão dos dados processados, visto que na modelagem 3D são utilizados dados do tipo complexo, de alta precisão, não sendo suportado pela biblioteca de dados nativa da linguagem. Por esse motivo os algoritmos foram então implementados em FORTRAN, que possui suporte para os dados do tipo complexo. Feito estas alterações, os programas foram executados e testados, tanto no ambiente serial quanto o ambiente paralelo.

Quanto ao desenvolvimento da modelagem 3D utilizando o método direto de decomposição LU para a resolução do Sistema Linear. Estudos continuam sendo realizados com o intuito de encontrar uma solução algorítmica consistente que possibilite realizar de forma eficiente a distribuição das linhas da matriz entre os nós do cluster, assim como a implementação da rotina distribuída responsável pela execução dos cálculos relativos a decomposição do sistema linear. Os dados finais sobre os estudos correspondentes a esta técnica estão sendo feitas como proposta para apresentação em trabalhos futuros.

BIBLIOGRAFIA

- a) ROCHA, B. R. P. **Modelo Fractal para resistividade complexa de rochas: sua interpretação petrofísica e aplicação à exploração geoelétrica.** 1995. Departamento de Geofísica. Universidade Federal do Pará.
- b) FARIAS, V. J. C. **Interpretação de Dados de Polarização Induzida usando o Modelo Fractal para Resistividade Complexa e Imagens Tomográficas.** 2004. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Pará.
- c) ROMANINI, Edivaldo. **Método dos elementos de contorno aplicado a problemas estacionários e de evolução.** 1990. Dissertação de Mestrado - Instituto de matemática, estatística e ciência da computação, Universidade Estadual de Campinas
- d) RIBEIRO, F.L.B. **Introdução ao método dos elementos finitos.** 2004. Programa de engenharia civil. COPPE / Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- e) AZEVEDO, Alvaro F. M. **Método dos elementos finitos.** Faculdade de engenharia. Universidade do Porto, 2003. 1 ed.
- f) CUNHA, Marcelo T. **Cálculo III: Fluxo de Campos Vetoriais e Teorema da divergência – notas de aula. 2008.** Departamento de Matemática – ICEx- Universidade Federal de Minas Gerais.
- g) FERREIRA, F. J. F. **Polarização Induzida e Potencial Natural.** 2002. Departamento de Geologia. Pós graduação em Geofísica Aplicada. Universidade Federal do Paraná.
- h) BECKER. E. B.; CAREY G. F.; ODEN. J. T. **Finite elements an introduction, Volume I.** New Jersey: Prentice-Hall. 1981.
- i) BURDEN, Richard L.; FAIRES, Douglas J. **Análise Numérica.** 1 ed. São Paulo: Thomson Pioneira. 2003. 736p.
- j) MOURA, Helyelson P.; MALAGUTTI, Walter. **Métodos de eletrorresistividade e da polarização induzida aplicados no estudo do aterro controlado de Piracicaba–SP.** 2007. UNESP, Geociências, v 26, n. 1, p. 35-43. Artigo Científico
- k) MOREIRA, C. A.; BRAGA, A. C. O. **Aplicação do método de polarização induzida em aterro controlado.** Pós-graduação em Geociências e Meio Ambiente, UNESP Geociências, v 27, n. 2, p. 219-227. 2008. Artigo Científico.

- l) GALLAS, J. D. F. et al. 2001. **Métodos e técnicas geoeletricas rasas na delimitação de área afetada por ruptura em teto de túnel urbano.** Revista Brasileira de Geofísica, Vol. 19 (1).
- m) GALLAS, J. D. F. 1999. **Geofísica – Uma Aplicação em Área Urbana de Ocorrência de Colapso de Terreno.** Acta Geologica Leopoldensia, XXIII: 103-109.
- n) COGGON, J. H. 1971. **Electromagnetic and electrical modelling by the finite element method.** Geophysics, n. 36; p. 132-155.
- o) ZHOU, B.; GREENHALGH S. A. **Finite Element Tree-dimensional Direct Current Resistivity Modelling: Accuracy and Efficiency Considerations.** Geophysics. J. Int., V. 145, p. 679-688 (2001).
- p) SASAKI, Y. 1994. **3-D resistivity inversion using finite-element method.** Geophysics, 59, 1839-1848.
- q) PITANGA, Marcos. **Construindo Supercomputadores com Linux.** 3 ed. Rio de Janeiro: Brasport, 2008. 400 p.
- r) BUYYA, Rajkumar. **High Performance Cluster Computing: Architectures and Systems.** Vol. 1. New Jersey: Prentice-Hall, 1999. 849p.
- s) FLYNN, M. J. **Some Computer Organizations and Their Effectiveness.** IEEE Transactions on Computers, v.C-21, n.9, p.948-960, Set. 1972.
- t) BOOKMAN, Charles. **Agrupamento de Computadores em Linux: aprenda a construir e manter grupos de computadores com Linux.** Rio de Janeiro: Ciência Moderna, 2003. 240p.
- u) MACHADO, Francis B.; MAIA, Luiz P. **Arquitetura de Sistema Operacionais.** 4 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007. 324p.
- v) TANENBAUM, Andrew. S. **Sistemas Operacionais Modernos.** 2 ed. Rio de Janeiro: Prentice-Hall, 2003. 707p.