

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/335034214>

# Método EBE de los elementos finitos para sistemas de gran tamaño y su aplicación en la Física Digital de Rocas

Article in *Revista Ingeniería* · August 2019

DOI: 10.15517/ri.v29i2.36140

---

CITATIONS

0

READS

30

1 author:



**Francisco Benavides**

National University of Costa Rica

8 PUBLICATIONS 72 CITATIONS

SEE PROFILE

1 **Método EBE de los elementos finitos para sistemas de gran tamaño y su aplicación en la**  
2 **Física Digital de Rocas**

3

4

5 **Resumen.**

6 El método de los elementos finitos (FEM) es una técnica numérica ampliamente utilizada en  
7 física e ingeniería, que aproxima soluciones de ecuaciones diferenciales en derivadas  
8 parciales en dominios arbitrarios. En general, el paso final de esta técnica consiste en la  
9 resolución de un sistema lineal de la forma  $Ax = b$  en el que la matriz  $A$  es dispersa y cuyo  
10 ancho de banda (número de filas no nulas en la matriz) depende del soporte de las funciones  
11 de forma definidas en los elementos. Cuando este número de elementos es muy grande,  
12 inclusive las representaciones en estructuras de datos eficientes para matrices dispersas son  
13 capaces de consumir en su totalidad la memoria de un computador poderoso. En este artículo  
14 se describe el método EBE (a.k.a. Element By Element), un truco computacional diseñado  
15 para implementar el método FEM sin utilizar la representación explícita de esta matriz. Se  
16 describe también un contexto en el que es necesaria esta implementación, en el área de la  
17 petrofísica digital de rocas, para estimar las propiedades elásticas de una muestra de roca a  
18 partir de imágenes tomográficas.

19

20 **Palabras clave:** Análisis Numérico, Elemento Finito, Elemento por Elemento, Petrofísica,  
21 Propiedades elásticas

## 22 **EBE finite element methodology for large scale systems applied to digital rock physics**

23

### 24 **Abstract**

25 The finite element method (FEM) is a numerical technique that estimates solutions of partial  
26 differential equations on arbitrary domains. It has been widely used to solve problems in  
27 physics and engineering. In general, the final step of this technique consists of a linear system  
28 of equations  $Ax = b$  in which the matrix  $A$  is sparse and its bandwidth depends on the finite  
29 element shape functions support. When the number of elements is large, even the efficient  
30 data structure sparse matrix representations can consume the entire computer memory. In this  
31 article, we describe a technique to solve these large-scale problems without explicitly  
32 representing this matrix. This computational trick is known as EBE (Element By Element).  
33 We also describe an application in which such kind of implementation is necessary, in the  
34 field of digital rock physics, to estimate the elastic coefficient of rock samples using micro-  
35 tomographic images.

36

37 **KeyWords:** Numerical Analysis, Finite Element, Element By Element, Petrophysics, Elastic  
38 properties

### 39 **Introducción**

40 El método de los elementos finitos (FEM) es una técnica proyectiva, en la que una  
41 función  $\varphi \in X$  de un espacio de Hilbert  $X$ , es aproximada de manera óptima en un sub-  
42 espacio  $U \subset X$  mediante su única proyección  $\varphi_U$  (Kress, 1999). La función  $\varphi$  es la solución  
43 de una ecuación diferencial en derivadas parciales sobre un dominio arbitrario, **dominio** que  
44 puede modelar un objeto físico real. Por otra parte  $U$  es, en general, un sub-espacio de

45 dimensión finita cuya base está formada por funciones de soporte compacto llamadas  
46 funciones de forma. Tales funciones suelen ser definidas con base en subdominios o  
47 elementos geométricos (triángulos o hexaedros, por ejemplo). La aproximación minimiza la  
48 norma  $\|\varphi - \varphi_U\|$  asociada a la forma variacional del problema, la cual se calcula en términos  
49 de productos internos en el espacio de funciones  $U$  (Hughes, 2000). La forma variacional  
50 representa la energía asociada al problema físico modelado y por esta razón, el FEM es  
51 ampliamente utilizado en aplicaciones de ingeniería, en áreas tales como Mecánica de  
52 Materiales y Teoría de Elasticidad (Slaughter, 2002). El FEM también es utilizado en la  
53 simulación de procesos físicos en la Física de Rocas; ciencia que relaciona observaciones  
54 geofísicas obtenidas remotamente con las propiedades físicas subyacentes de las rocas, tales  
55 como composición, porosidad, permeabilidad, coeficientes elásticos, etc (Mavko et al., 2003).  
56 Las propiedades mecánicas de las rocas son útiles para estimar sus procesos de deformación  
57 y son aplicadas en la Ingeniería de Petróleo para optimizar los métodos de perforación y  
58 extracción (Tiab and Donaldson, 2012). Estas propiedades pueden ser obtenidas a partir de  
59 ensayos de laboratorio, pero recientemente esto se ha hecho a partir de imágenes  
60 tomográficas de muestras de las rocas del reservorio. Obtener tales imágenes para simular,  
61 en un computador, los procesos físicos del espacio poroso y mineral de la estructura rocosa es  
62 el paradigma de la Física Digital de las Rocas.

63

64 Este artículo se basa en el enfoque descrito en (Garboczi and Day, 1995) para estimar  
65 el módulo de Young o módulo de Elasticidad de una muestra de roca, digitalizada mediante  
66 una secuencia de imágenes tomográficas. Ese trabajo utiliza la versión más simple de la  
67 técnica de los elementos finitos, utilizando apenas interpolaciones lineales entre los nodos y  
68 métodos clásicos de gradiente para resolver el sistema lineal asociado. Mi interés no es  
69 justificar la utilización de los elementos finitos para resolver el problema, ni en proponer

70 algún método novedoso para el FEM. Considero que ese tipo de justificaciones ya han sido  
71 abordadas por ejemplo en (Arns et al., 2002; Garboczi and Day, 1995; Makarynska et al.,  
72 2008; Roberts and Garboczi, 2000). En esos artículos, se utiliza FEM para estimar el módulo  
73 de Young, utilizando una cantidad muy grande de grados de libertad (definiendo un elemento  
74 por voxel), con sistemas de ecuaciones lineales que pueden llegar fácilmente a más de cien  
75 millones de incógnitas. Los artículos citados no describen con detalle los aspectos  
76 computacionales que hay que tener en cuenta a la hora de resolver sistemas de ese tamaño, lo  
77 que puede llevar a la conclusión errónea de que son necesarios super computadores de gran  
78 tamaño para su tratamiento. En realidad, sistemas de este orden pueden ser resueltos en  
79 Workstations comunes con la metodología que se describe en este artículo, la cual, de hecho,  
80 ha sido utilizada con éxito en (Leiderman et al., 2017). Cabe resaltar que el rango de  
81 aplicaciones se puede extender a otros tipos de problemas mecánicos (Betancur et al., 2018).  
82 El truco computacional descrito en este trabajo no es novedoso, pero representa una marcada  
83 diferencia entre la utilización óptima de los recursos computacionales y la falsa necesidad de  
84 aumentar la capacidad del hardware con el fin de abordar este tipo de problemas.

85

86 Vale la pena remarcar que debido a la existencia actual de una gran cantidad de  
87 implementaciones computacionales del FEM, tanto comerciales como libres, su utilización  
88 para estimar el módulo de Young a partir de imágenes parece una escogencia obvia, natural y  
89 preferible. Sin embargo, como se verá a lo largo de este artículo, la mayor parte de estos  
90 programas hacen implementaciones genéricas de los elementos finitos que no optimizan las  
91 características especiales del caso aquí presentado. De hecho, su utilización para simular un  
92 ensayo de laboratorio no es posible para tamaños relativamente grandes, que son normales en  
93 el contexto de la Física Digital de Rocas, y una implementación genérica del FEM agota  
94 fácilmente los recursos de la máquina.

95 De este modo, la implementación descrita en el presente artículo surge a raíz de la  
96 necesidad de simular numérica y computacionalmente un experimento de laboratorio  
97 (específicamente un ensayo de compresión uniaxial, como se describe en las siguientes  
98 secciones) con base en una secuencia de imágenes de una muestra de roca. Tales imágenes  
99 representan, con precisión, la estructura del medio poroso y permiten realizar múltiples  
100 ensayos virtuales no destructivos en la muestra. La utilización de imágenes para simular  
101 experimentos de laboratorio tiene algunas ventajas de rapidez, eficiencia y costo, pero  
102 también tiene el interés científico de conducir a una mejor comprensión del fenómeno físico  
103 modelado (Andrá et al., 2013). Entre los muchos ejemplos que se pueden citar, se puede  
104 considerar el trabajo de (Benavides et al., 2017), donde se propone una metodología  
105 computacional para mejorar la estimación de un parámetro de la roca, utilizando  
106 experimentos virtuales en imágenes tomográficas.

107

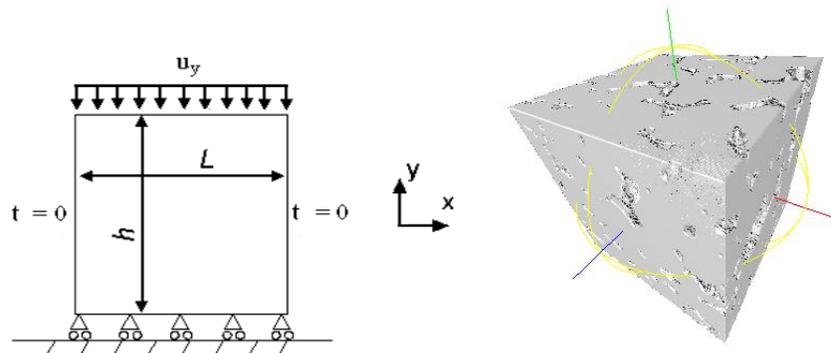
108 El resto del artículo se distribuye de la siguiente manera: En el marco teórico se hace  
109 una descripción sucinta del ensayo de compresión uniaxial. Luego se describe el método  
110 FEM desde el punto de vista de la implementación para este tipo de ensayo. Se aborda la  
111 resolución, por medio de FEM, de la ecuación elastostática, describiendo los operadores y la  
112 forma de calcularlos. En la siguiente sección se describe el método EBE de manera detallada,  
113 tratando de definir, paso por paso, un algoritmo implementable. Se trata de llenar los vacíos  
114 de otras descripciones menos detalladas, como por ejemplo (Leiderman et al., 2017; Ulrich et  
115 al., 1998). Luego se describen otros detalles computacionales, como la forma de paralelizar y  
116 validar. Se concluye en la sección final.

117

## 118 **Marco teórico**

### 119 *2.1.- Ecuación elastostática y el ensayo de compresión uniaxial*

120 La prueba de compresión uniaxial es un ensayo de laboratorio en el que se estima el  
121 coeficiente de Young de una muestra de roca (Hudson and Harrison, 2000). Mide la  
122 compresibilidad homogénea equivalente de una muestra heterogénea de roca, compuesta por  
123 diferentes tipos de materiales con diferentes propiedades mecánicas y por un espacio de poros  
124 vacíos con geometría arbitraria. La prueba consiste en someter la muestra a una deformación  
125 fija  $u_y$  a lo largo del eje Y, manteniendo libertad de movimiento en los otros ejes (Ilustración  
126 1, izquierda). Para lograr tal deformación, se ha necesitado aplicar una presión en el área  
127 superior, dando como resultado una fuerza total  $F$ . Tal fuerza se relaciona con la deformación  
128 mediante la ecuación:  $\frac{F}{A} = E \frac{u_y}{h}$  donde  $E$  es el coeficiente de Young efectivo,  $h$  es la altura de  
129 la muestra y  $A$  es el área de la parte superior. Esta ecuación define la ley de Hooke en una  
130 dimensión. Para calcular esta fuerza se utiliza la solución del campo de desplazamiento de la  
131 ecuación elastostática. Con este campo, es posible calcular las presiones en la superficie  
132 superior de la muestra y, mediante integración numérica, calcular la fuerza en toda la  
133 superficie. Las condiciones de contorno son descritas mediante el desplazamiento  $u_y$  y la  
134 fijación de la superficie inferior de la muestra. No hay otras presiones externas. Un modelo  
135 de muestra de roca (Ilustración 1, derecha) incluye gran cantidad de detalles del medio  
136 poroso, por lo que la malla debe ser fina. Habitualmente se utiliza un voxel por elemento lo  
137 que produce sistemas de gran tamaño. Esto se aborda con más detalle en las siguientes  
138 secciones.



139

140 **Ilustración 1. Izquierda. Esquema de un ensayo de compresión uniaxial. Derecha.**141 **Textura 3D de una muestra de roca, obtenido como una malla 3D. La resolución es de 1**142 **micrómetro por voxel y la imagen es de 200x200x200 voxels**

143

144 **2.2.- Resolución de la ecuación elastostática**

145 En esta sección se hace una breve presentación del método de los elementos finitos  
 146 (FEM) en el contexto de la ecuación elastostática. El objetivo de esta sección es describir  
 147 algunas ideas básicas, suficientes para explicar la técnica EBE. Se sigue de cerca la  
 148 presentación de (Hughes, 2000) y (Garboczi and Day, 1995). Lo aquí expuesto puede  
 149 utilizarse para una implementación clásica del FEM.

150

151 Quizás la forma más directa de visualizar el FEM es como una técnica proyectiva,  
 152 usada para resolver ecuaciones diferenciales y que culmina, en general, con un sistema lineal  
 153  $K\mathbf{c} = \mathbf{f}$ . Supongamos que  $\mathbf{u}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  es un campo vectorial con producto interno definido  
 154  $a(\cdot, \cdot)$ . En el método de los elementos finitos, cada una de las entradas de  $\mathbf{u}$ , denotada por  
 155  $u_i, i = 1, 2, 3$  es aproximada mediante una combinación lineal de funciones de forma  
 156  $\{N_A: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}, A = 1, \dots, N\}$  y una función  $g_i$  asociada a las condiciones de contorno del

157 dominio. Si  $\tilde{\mathbf{u}}$  es tal aproximación, entonces cada una de sus entradas  $\tilde{u}_i$  está dada por:

158

$$\tilde{u}_i = \sum_{A=1}^N c_{Ai} N_A + g_i \quad (1)$$

159

160 Esto produce  $3N$  incógnitas  $c_{Ai}$ . Si  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$  son los vectores de la base Euclídea en  $\mathbb{R}^3$ ,

161 entonces, al aplicar la propiedad ortográfica a esta proyección, se obtiene:

162

$$a(N_A \mathbf{e}_j, \mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = 0 \quad j = 1, 2, 3 \quad (2)$$

163 La forma de elegir el operador  $a(\cdot, \cdot)$  está asociada con la ecuación diferencial por resolver.

164 En este caso se trata de la ecuación elastostática, que en notación indicial tiene la forma:

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (3)$$

165 Donde el doble índice denota sumatoria y la coma, diferenciación con respecto a la variable

166 indizada. Los valores de  $\sigma_{ij}$  conforman el tensor de tensiones, simétrico, de tamaño  $3 \times 3$ .

167 Este tipo de notación es empleada por (Hughes, 2000), y se caracteriza por ser compacta y

168 breve. Hallar la solución consiste en obtener el campo de desplazamiento  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$  en

169 todo el dominio. Este campo está relacionado con el tensor de tensiones por medio de la ley

170 de Hooke (Slaughter, 2002):

171

172

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

173 Donde las constantes  $c_{ijkl}$  corresponden al tensor de rigidez, dependiente del tipo de material

174 y  $\epsilon_{kl}$  es el tensor simétrico de desplazamientos, definido en términos de los desplazamientos

175  $u_i$  como:

$$176 \quad \epsilon_{kl} = u_{(k,l)} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k})$$

177

178 En materiales isotrópicos el tensor  $c_{ijkl}$  es simplificado en una matriz  $6 \times 6$  sacando

179 provecho de la simetría de los tensores de desplazamiento y el de tensiones. La forma de la

180 Ley de Hooke para este caso es:

181

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\mu + \lambda & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 2\mu + \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & 2\mu + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{23} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (4)$$

182

183 Donde  $\mu$  y  $\lambda$  son las constantes de Lamé del material modelado. Para que el problema esté

184 bien planteado, se deben definir las condiciones de contorno que se clasifican en dos tipos:

185 condiciones de Neuman y condiciones de Dirichlet (Hughes, 2000). En mecánica, estas

186 condiciones pueden ser interpretadas de la siguiente forma:

187

188 1. Condiciones de contorno en las que el desplazamiento es conocido  $T_G$

189 2. Condiciones de contorno en las que es conocida la tensión externa aplicada  $T_H$

190

191 En este caso, no existen tensiones externas, pero sí un desplazamiento conocido, tal y

192 como se corresponde en la prueba de compresión uniaxial. De esta manera, las condiciones

193 de contorno son:  $u_i = q_i$  para los desplazamientos conocidos y  $\sigma_{ij}n_j = 0$  en los puntos de

194 frontera donde no se aplican presiones externas. El vector  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  es un vector

195 normal superficial. En la expansión de la ecuación (1), la función  $g_i$  estará asociada a las  
 196 condiciones de contorno  $T_G$ .

197

198 Para la implementación computacional del operador  $a(\cdot, \cdot)$ , se define la matriz de  
 199 derivadas para la función de forma indizada por  $A$  como  $D_A$ :

200

$$201 \quad D_A = \begin{pmatrix} N_{A,1} & 0 & 0 \\ 0 & N_{A,2} & 0 \\ 0 & 0 & N_{A,3} \\ 0 & N_{A,3} & N_{A,2} \\ N_{A,3} & 0 & N_{A,1} \\ N_{A,2} & N_{A,1} & 0 \end{pmatrix}$$

202

203 La matriz de integrales para los índices  $A$  y  $B$ ,  $K_{AB} = \int D_A^t K_e D_B$  se calcula en todo el  
 204 dominio de integración. La matriz  $K_e$  está definida por la ecuación (4). El producto interno  
 205  $a(N_A \mathbf{e}_i, N_B \mathbf{e}_j)$  que depende de los índices  $A$  y  $B$  de las funciones de forma y de los índices  $i$   
 206 y  $j$  contenidos en el conjunto  $\{1,2,3\}$ , se define como la entrada  $(i, j)$  de la matriz  $K_{AB}$ . Esto  
 207 puede escribirse como  $a(N_A \mathbf{e}_i, N_B \mathbf{e}_j) = \mathbf{e}_i^t K_{AB} \mathbf{e}_j$ . Con este montaje, lo que ocurre es que  
 208 para cualesquiera campos vectoriales  $\mathbf{W} = W_1 \mathbf{e}_1 + W_2 \mathbf{e}_2 + W_3 \mathbf{e}_3$  y  $\mathbf{V} = V_1 \mathbf{e}_1 + V_2 \mathbf{e}_2 +$   
 209  $V_3 \mathbf{e}_3$  se tendrá  $a(\mathbf{W}, \mathbf{V}) = \int W_{(i,j)} c_{ijkl} V_{(k,l)}$ . Volviendo a la propiedad ortográfica de la  
 210 ecuación (2), se tiene que:

$$211 \quad a(N_A \mathbf{e}_j, \mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = a(N_A \mathbf{e}_j, \mathbf{u}) - a(N_A \mathbf{e}_j, \tilde{\mathbf{u}}) = 0$$

212

213 Donde  $a(N_A \mathbf{e}_j, \mathbf{u}) = \int (N_A \mathbf{e}_j)_{(p,q)} c_{pqkl} u_{(k,l)} = \int (N_A \mathbf{e}_j)_{(p,q)} \sigma_{pq}$ . Por el

214 Teorema de Green, se obtiene la siguiente separación (Hughes, 2000):

215

$$216 \quad \int (N_A \mathbf{e}_j)_{(p,q)} \sigma_{pq} = - \int N_A \sigma_{jq,q} + \oint_T N_A \sigma_{jq} n_q$$

217

218 La integral de contorno es evaluada en  $T = T_H \cup T_G$ . Suponiendo que las funciones de forma  
 219  $N_A$  son iguales a cero en  $T_G$  y que no existen tensiones externas, el resultado de esta suma es  
 220 igual a 0, debido a la ecuación (3). La ecuación (2) se simplifica de la siguiente manera:

221

$$222 \quad a(N_A \mathbf{e}_j, \tilde{\mathbf{u}}) = a\left(N_A \mathbf{e}_j, \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i \mathbf{e}_i\right) = 0$$

223

224 Utilizando ahora la expansión de la ecuación (1) en este resultado, se obtiene:

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{B=1}^N c_{Ai} a(N_A \mathbf{e}_j, N_B \mathbf{e}_i) = -a(N_A \mathbf{e}_j, \mathbf{g}) \quad (5)$$

225

226 En el FEM, se asume que  $\mathbf{g}$  es combinación lineal de funciones de soporte compacto  
 227 (similares a las de forma) que no se anulan en el contorno  $T_G$ . La resolución de este sistema  
 228 lineal  $K\mathbf{c} = \mathbf{f}$ , donde  $K$  es la matriz de productos internos  $a(N_A \mathbf{e}_j, N_B \mathbf{e}_i)$  y  $\mathbf{f}$  tiene por  
 229 entradas los productos  $-a(N_A \mathbf{e}_j, \mathbf{g})$ , es el paso final del método.  $K$  es de tamaño  $3N \times 3N$ .  
 230 Las funciones de forma son cero en la mayoría de los elementos del dominio, de modo que  
 231 para cada  $A$ , existen solamente un número limitado de índices  $B$  para los cuales el producto  
 232  $a(N_A \mathbf{e}_j, N_B \mathbf{e}_i)$  no es cero. El número máximo de índices para el que esto ocurre es el ancho  
 233 de banda de la matriz de rigidez  $K$ . El sistema de ecuaciones es resuelto mediante la técnica  
 234 iterativa del gradiente conjugado (Trefethen and Bau, 1997).

235

### 236 3- Descripción del algoritmo EBE

#### 237 3.1- Implementación del método EBE

238 Para evitar los costos computacionales de representar la matriz de productos internos  
239  $K_{ij} = a(N_A \mathbf{e}_j, N_A \mathbf{e}_i)$  se utiliza el método EBE. Esta idea ya fue utilizada en la estimación de  
240 los coeficientes elásticos de huesos trabeculares (van Rietbergen et al., 1995). En este trabajo,  
241 los autores mencionan que la matriz de productos internos  $K$  no precisa ser montada y que se  
242 puede aprovechar la regularidad del modelo (todos los elementos tienen el mismo tamaño)  
243 para ahorrar memoria y procesamiento. Asumen que las propiedades de la fase sólida de  
244 todos los elementos son idénticos, lo que, como veremos a continuación, no es necesario. Los  
245 autores tampoco aplican ninguna preconditionación a esta matriz. En el algoritmo que se describe  
246 a continuación también se aplica (de manera opcional) un preconditionador de Jacobi  
247 (Trefethen and Bau, 1997).

248

249 La estrategia EBE está ligada con el proceso iterativo que obtiene la solución del  
250 sistema lineal  $K\mathbf{c} = \mathbf{f}$ . El método de los gradientes conjugados (así como cualquier otra  
251 técnica iterativa aplicada a este caso), se basa en sucesivos productos de matriz por vector  
252  $\mathbf{s} = K\mathbf{r}$  que van mejorando la aproximación de la solución en cada iteración. Aunque en esta  
253 técnica numérica se efectúan otros cálculos vectoriales, este producto matricial es el proceso  
254 más pesado computacionalmente. En lugar de calcular esta matriz de una sola vez, la  
255 estrategia EBE toma como entrada el vector  $\mathbf{r}$  y lo va multiplicando por los productos  
256 internos  $a(N_A \mathbf{e}_j, N_A \mathbf{e}_i)$  elemento por elemento, actualizando al mismo tiempo, el vector  
257 resultante  $\mathbf{s}$ . En otras palabras, la matriz  $K$  es ensamblada, por partes, en cada iteración,  
258 actuando inmediatamente sobre el vector resultante, sin almacenar nunca en memoria todos  
259 los valores de la estructura matricial.

260

261 La tarea de calcular los productos internos de las funciones de forma en cada  
 262 iteración del método del gradiente conjugado es más optimizable cuando la malla es regular o  
 263 parcialmente regular. Es decir, cuando está conformada por un conjunto limitado de clases de  
 264 elementos. El almacenamiento en memoria de los productos internos asociados a cada  
 265 elemento requiere únicamente una matriz  $24 \times 24$ . Este producto depende de las constantes  
 266 de Lamé y la geometría del elemento. En física de rocas, las muestras en general se  
 267 consideran bifásicas (solo tienen fase sólida y poro), pues el mayor interés se centra en el  
 268 estudio del espacio de poro. Los elementos son cubos del mismo tamaño, uno por cada  
 269 voxel. Por esa razón, la matriz de productos internos sólo debe ser calculada una vez.  
 270 Finalmente, para mejorar la velocidad de convergencia, se utiliza el preconditionador de  
 271 Jacobi, de modo que los elementos de la diagonal de  $K$  son unitarios. Resumiendo, el método  
 272 EBE requiere del cálculo previo de la matriz de productos internos  $P_k = a(N_A \mathbf{e}_j, N_A \mathbf{e}_i)_{ij}$   
 273 para cada tipo de elemento. Cada una de estas matrices tiene tamaño  $24 \times 24$ . El producto  
 274 vectorial  $K\mathbf{r}$  donde  $K$  es la matriz de rigidez del sistema, se calcula iterando en cada elemento  
 275  $E_w$  con base en el siguiente algoritmo, que aprovecha también la simetría de la matriz de  
 276 rigidez  $K$ :

277

Entrada: vector  $\mathbf{r}$ , matrices de productos internos  $P_w$  (para cada elemento  $E_w$ )

Salida: vector  $\mathbf{s} = K\mathbf{r}$ . Vector preconditionador  $\mathbf{d}$ .

Inicializar  $\mathbf{s} = 0$ .

Iterar sobre todos los elementos  $E_w$

Para  $A = 1, 2, \dots, 8$ , índices de los nodos de  $E_w$

Para  $B = A, \dots, 8$ , índices de los nodos de  $E_w$

Para  $i_1 = 1, 2, 3$  e  $i_2 = 1, 2, 3$

Sea  $p$  el índice de la fila de  $K$  correspondiente al nodo  $A$  y al grado de libertad  $i_1$ .

Sea  $q$  el índice de la fila de  $K$  correspondiente al nodo  $B$  y al grado de libertad  $i_2$ .

Sea  $v = P_w[3(A - 1) + i_1, 3(B - 1) + i_2]$

$$\mathbf{s}[p] = \mathbf{s}[p] + \mathbf{r}[q] \cdot v$$

Si  $A \neq B$  entonces  $\mathbf{s}[q] = \mathbf{s}[q] + \mathbf{r}[p] \cdot v$

Si  $p = q$  se actualiza el preconditionador  $\mathbf{d}[p] = \mathbf{d}[p] + v$  (esto únicamente se realiza durante la primera iteración, guardando en memoria el preconditionador  $\mathbf{d}$ ).

Multiplicar cada entrada  $\mathbf{s}[i]$  por  $1/\mathbf{d}[i]$  (preconditionador de Jacobi).

278

279

### 280 3.2- Paralelización

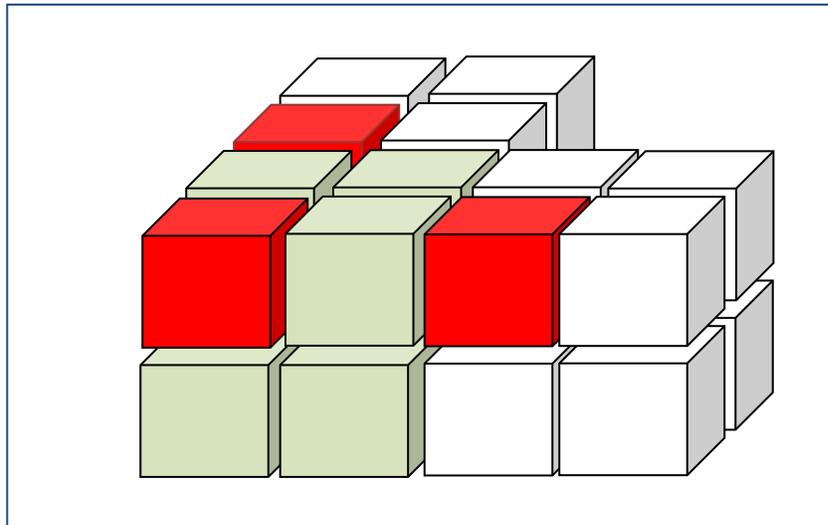
281

282 Con el objeto de acelerar las operaciones computacionales, el trabajo que se realiza  
283 en cada elemento en el algoritmo descrito en la sección anterior debe ser ejecutado en  
284 paralelo. No es posible distribuir los elementos entre cada procesador de manera arbitraria, ya  
285 que dos elementos distintos, siendo procesados en procesadores diferentes, pueden intentar  
286 actualizar la misma entrada del vector resultante  $\mathbf{s}$ . Para evitar eso, es necesario separar los  
287 elementos en grupos diferentes, de modo que no exista intersección de los nodos de los  
288 elementos de cada grupo. Los grupos se procesan secuencialmente pero cada grupo se  
289 procesa en paralelo, pues no existen colisiones. En una malla regular tridimensional en la que  
290 cada voxel es un elemento, son necesarios únicamente 8 grupos diferentes. Esta división se  
291 lleva a cabo numerando cada voxel de la imagen de manera secuencial. Para el elemento  
292 asociado al voxel  $j$ , el grupo al que pertenece está dado simplemente por  $j \pmod{8}$ . Este tipo  
293 de paralelización puede ser llevada a cabo tanto en la CPU como en un procesador gráfico  
294 (GPU) con suficiente memoria.

295 En la Ilustración 2 se muestra el esquema de división de grupos y numeración para  
296 la paralelización. En el caso ilustrado se actualizan los productos internos correspondientes a  
297 los elementos numerados con los valores de  $j$  tales que  $j \pmod{8} = 1$ , coloreados en rojo.  
298 Los productos internos de las funciones de forma dentro de esos elementos no actualizan  
299 nunca la misma fila del vector resultante, por que los nodos nunca coinciden en cada  
300 elemento. Por esta razón, todos esos elementos en rojo pueden ser procesados en paralelo, sin  
301 necesidad de utilizar comandos de exclusión o MUTEXes (Reif and Rajasekaran, 2008).

302

303



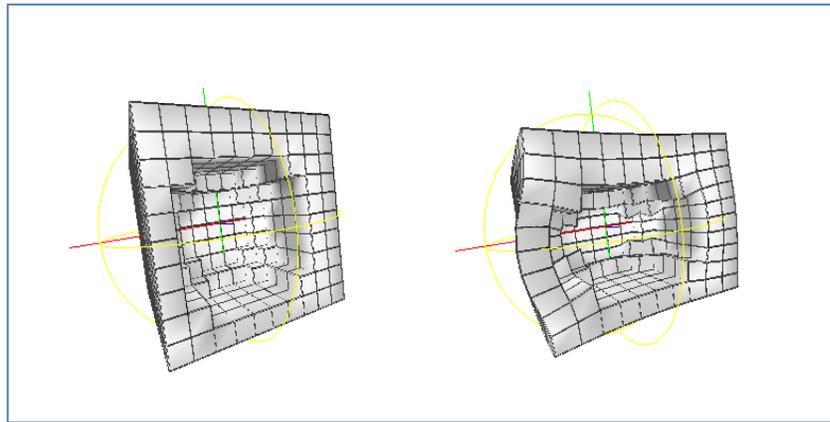
304

305 **Ilustración 2. Distribución paralela de los elementos durante una iteración. Se muestran tres grupos de 8**  
 306 **voxels donde se realizan los productos internos de las funciones de forma que no se nulifican en los voxels**  
 307 **coloreados en rojo. Es de notar que estos voxels coloreados no tienen nodos en común y por tanto no**  
 308 **actualizan nunca la misma fila del vector resultante. Los otros 7 grupos son trabajados en paralelo en pasos**  
 309 **subsecuentes.**

310

311 Es importante recalcar que la metodología propuesta aquí simplemente posibilita la  
 312 resolución de la ecuación elastostática en casos donde el número de elementos es tan grande  
 313 que no puede ser administrado por un software FEM comercial. Pero el resultado final entre  
 314 montar la matriz  $K$  y no hacerlo debería ser exactamente el mismo. Por esa razón, una forma  
 315 de validar esta metodología consiste en comparar el campo de desplazamiento obtenido, con el  
 316 de un software comercial (en una malla pequeña, Ilustración 3). Una prueba de este tipo sería  
 317 suficiente para validar la implementación, pero también es posible utilizar una malla grande  
 318 (por ejemplo,  $400 \times 400 \times 400$ ) sin poros, comparando el módulo de Young obtenido con el  
 319 que fue utilizando en cada elemento. El resultado debería ser el mismo.

320



321

322 **Ilustración 3. Izquierda: Malla pequeña, porosa y regular. Derecha. Ensayo de**  
323 **compresión uniaxial aplicado a la malla, usando FEM.**

### 324 **3- Validación**

325 La eficiencia y velocidad del truco computacional expuesto en el presente trabajo  
326 depende de detalles de implementación tales como el hardware utilizado, el lenguaje de  
327 programación en el que se desarrolla el método, la forma en que se organiza la disposición de  
328 los elementos y los nodos en la memoria, las particularidades del medio poroso representado.  
329 Se ha pretendido que el algoritmo descrito en la sección 3-1 no dependa de estos factores.  
330 Creo que es interesante observar que mi implementación, realizada en C++ y ejecutada en  
331 una Workstation Dell XPS (con 16 GB de RAM y 8 procesadores en hyperthread), procesa  
332 imágenes de tamaño  $400 \times 400 \times 400$  con más de 190 millones de grados de libertad en  
333 poco más de 25 minutos. Este experimento sería imposible de resolver utilizando el método  
334 FEM representando explícitamente la matriz de rigidez sin hacer uso de una memoria RAM  
335 de más de 120 GB. Por el contrario, con el método EBE es necesario apenas un 5% de esta  
336 memoria. No obstante, considero que es posible aún mejorar múltiples detalles de  
337 implementación y obtener mejores rendimientos. Las consideraciones antes expuestas, de  
338 tipo cualitativo, no deberían ser una guía para la validación o la confirmación de una

339 implementación específica, sino apenas una orientación para quien necesite crear un software  
 340 de elemento finito con características similares a las expuestas en el presente trabajo.

341

342 Es importante notar que lo que se ha descrito aquí es apenas es una técnica de  
 343 implementación, cuyos resultados deberían ser totalmente equivalentes a los obtenidos con  
 344 un método FEM tradicional, con software comercial o libre, bajo las mismas condiciones. Por  
 345 ejemplo, el número de iteraciones del gradiente conjugado usando EBE, es el mismo que se  
 346 obtiene con la representación explícita de la matriz pues la novedad de este algoritmo es que  
 347 se está alterando es la forma de representar la matriz de forma y la técnica para calcular el  
 348 producto matriz-vector. En general, el método EBE es más lento que el explícito, pero solo  
 349 pueden realizarse tales comparaciones en imágenes de tamaño máximo de  $100 \times 100 \times 100$   
 350 en el computador descrito. La diferencia en velocidad es aproximadamente de 1 a 5.

351

352 En el contexto de la estimación del módulo de Young para medios porosos, es  
 353 posible validar la implementación utilizando el trabajo de (Hashin, 1983). Suponiendo una  
 354 muestra bifásica con constantes de compresibilidad y elasticidad transversal  $K_S, \mu_S$  para la  
 355 matriz y  $K_P, \mu_P$  para las inclusiones porosas, entonces los módulos de compresibilidad y  
 356 elasticidad transversal  $K, \mu$  de la muestra están dados por:

357

$$\begin{aligned} K &= K_S + pP^{SP}(K_P - K_S) \\ \mu &= \mu_S + pQ^{SP}(\mu_P - \mu_S) \end{aligned} \quad (6)$$

358

359 Donde  $P^{SP} = \frac{3K_S + 4\mu_S}{3K_P + 4\mu_S}$ ,  $Q^{SP} = \frac{\mu_S + F_S}{\mu_P + F_S}$  y  $F_S = \frac{\mu_S}{6} \cdot \frac{9K_S + 8\mu_S}{K_S + 2\mu_S}$  y  $p$  es la porosidad o razón  
 360 volumétrica de las inclusiones. El módulo de Young equivalente se obtiene utilizando estas

361 constantes (Slaughter, 2002):

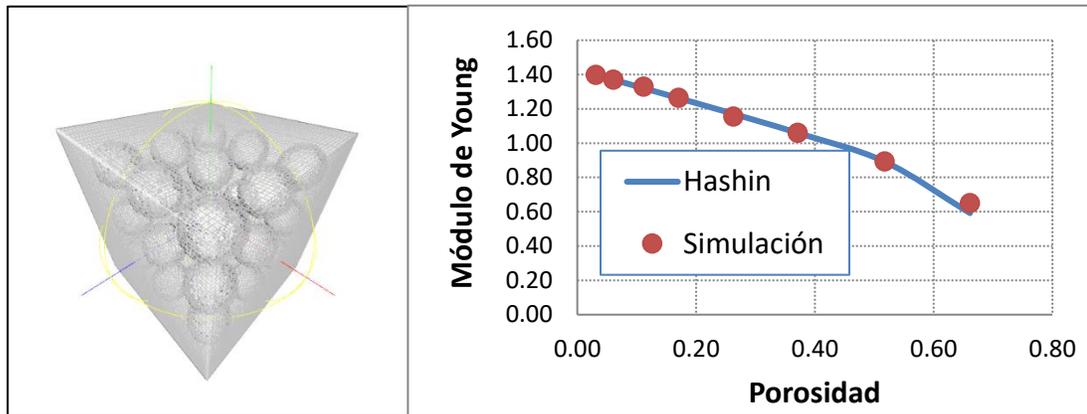
$$E = \frac{9K\mu}{3K + \mu} \quad (7)$$

362

363 Estas ecuaciones son válidas bajo la suposición de que las inclusiones porosas dentro  
 364 de la muestra son esféricas y están diluidas dentro de la matriz. Esto significa que la  
 365 distribución de los poros es uniforme (isotropía) y que la tensión interna en un poro no está  
 366 influenciada por los otros poros. Este es el comportamiento de una matriz porosa infinita  
 367 (Roberts and Garboczi, 2002). Estas fuertes condiciones pueden ser reproducidas en el  
 368 espacio discreto de las imágenes, usando esferas discretas de Bresenham (Bresenham, 1965)  
 369 distribuidas simétricamente en la matriz (como se ilustra en la Ilustración 4, izquierda). Los  
 370 resultados del ensayo de compresión en esta estructura se ajustan muy bien a las ecuaciones  
 371 teóricas (6) y (7) (Ilustración 4, derecha). Para esta validación se ha utilizado  $\lambda_P = \frac{\lambda_S}{3} = 1$  y  
 372  $\mu_P = \frac{\mu_S}{2} = \frac{1}{4}$  en unidades normalizadas para las fases sólida y porosa. El error relativo se  
 373 incrementa con la porosidad, hasta que la hipótesis de poros diluidos de Hashin deja de  
 374 cumplirse (porosidad mayor a 0.6). Los errores relativos de los otros casos, para porosidades  
 375 menores a 0.6, aunque muy pequeños (menores al 1%), no son nulos. Esto se debe a los  
 376 errores de discretización del modelado de las inclusiones esféricas en un espacio basado en  
 377 voxels.

378 Este esquema de validación es útil cuando es imposible realizar un ensayo de  
 379 compresión basado en una implementación comercial tradicional, debido al tamaño y número  
 380 de las imágenes. Los resultados mostrados se han ejecutado en 200 imágenes de tamaño  
 381  $200 \times 200$ , lo que produce 8 millones de elementos.

382



383

384 Ilustración 4. Izquierda. Distribución uniforme de un arreglo de 27 poros esféricos dentro de una matriz  
 385 sólida. Derecha. Esferas. Módulo de Young normalizado obtenido a partir de un ensayo de compresión  
 386 aplicado a la muestra, alterando el radio de las esferas para obtenerlo como una función de la porosidad.  
 387 Línea continua, módulo de Young teórico, obtenido como función de la porosidad utilizando las ecuaciones  
 388 (6) y (7).

389

### 390 3- Conclusiones

391 Como se ha dicho anteriormente, este tipo de implementación de elementos finitos es  
 392 útil en contextos similares a lo que se ha descrito aquí: Física Digital de Rocas para la  
 393 estimación de parámetros de modelos muy heterogéneos, utilizando FEM con muchos  
 394 elementos iguales y regulares. Se adapta fácilmente también para condiciones de contorno  
 395 periódicas, en donde se supone que la muestra está sumergida en un medio infinito y regular.  
 396 Su aplicación en computadores de mayor poder permite resolver imágenes de orden  $1000^3$  o  
 397 inclusive  $2000^3$  (en los que el número de grados de libertad está en el orden de billones). Sin  
 398 duda, el método EBE es la única opción viable para implementar la técnica clásica de los  
 399 elementos finitos cuando el número de elementos y de grados de libertad producen una  
 400 matriz de rigidez que sobrepasa las capacidades físicas de un computador.

401

402 La gran cantidad de implementaciones comerciales existentes para resolver

403 problemas numéricos mediante el FEM puede causar la impresión de que no es necesario

404 programar otro tipo de implementaciones y apenas utilizar las que ya existen, pues de todos  
 405 modos ya están optimizadas y depuradas. En este artículo hemos descrito un contexto en el  
 406 que una implementación genérica comercial no es aplicable. Bajo estas circunstancias, un  
 407 usuario de estas aplicaciones puede verse en una situación en la que los requerimientos de  
 408 hardware son imposibles o tienen un costo muy alto, por lo que el esfuerzo de “reinventar la  
 409 rueda” y crear una implementación propia tiene una ventaja importante desde el punto de  
 410 vista del costo-beneficio.

#### 411 **Referencia bibliográficas**

- 412 Andrä, H., Combaret, N., Dvorkin, J., Glatt, E., Han, J., Kabel, M., Keehm, Y., Krzikalla, F.,  
 413 Lee, M., Madonna, C., Marsh, M., Mukerji, T., Saenger, E.H., Sain, R., Saxena, N.,  
 414 Ricker, S., Wiegmann, A., Zhan, X., 2013. Digital rock physics benchmarks-Part I:  
 415 Imaging and segmentation. *Comput. Geosci.* 50, 25–32.  
 416 <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2012.09.005>
- 417 Arns, C.H., Knackstedt, M.A., Pinczewski, W.V., Garboczi, E.J., 2002. Computation of  
 418 linear elastic properties from microtomographic images: Methodology and agreement  
 419 between theory and experiment. *Geophysics* 67, 1396–1405.  
 420 <https://doi.org/10.1190/1.1512785>
- 421 Benavides, F., Leiderman, R., Souza, A., Carneiro, G., Bagueira, R., 2017. Estimating the  
 422 surface relaxivity as a function of pore size from NMR T2 distributions and micro-  
 423 tomographic images. *Comput. Geosci.* 106. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2017.06.016>
- 424 Betancur, A., Anflor, C., Pereira, A., Leiderman, R., 2018. Determination of the Effective  
 425 Elastic Modulus for Nodular Cast Iron Using the Boundary Element Method. *Metals*  
 426 (Basel). 8, 641. <https://doi.org/10.3390/met8080641>
- 427 Bresenham, J.E., 1965. Algorithm for computer control of a digital plotter. *IBM Syst. J.* 4,

- 428 25–30. <https://doi.org/10.1147/sj.41.0025>
- 429 Garboczi, E.J., Day, A.R., 1995. An algorithm for computing the effective linear elastic  
430 properties of heterogeneous materials: Three-dimensional results for composites with  
431 equal phase poisson ratios. *J. Mech. Phys. Solids* 43, 1349–1362.  
432 [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(95\)00050-5](https://doi.org/10.1016/0022-5096(95)00050-5)
- 433 Hashin, Z., 1983. Analysis of Composite Materials---A Survey. *J. Appl. Mech. Asme* 50.  
434 <https://doi.org/10.1115/1.3167081>
- 435 Hudson, J.A., Harrison, J.P., 2000. *Engineering Rock Mechanics: An Introduction to the*  
436 *Principles*. Elsevier Science, pp. 86–96.
- 437 Hughes, T.J.R., 2000. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element*  
438 *Analysis*, in: *Dover Civil and Mechanical Engineering*. Dover Publications, pp. 57–107.
- 439 Kress, R., 1999. *Linear Integral Equations*, in: *Applied Mathematical Sciences*. Springer New  
440 York, pp. 218–245.
- 441 Leiderman, R., Pereira, A.M.B., Benavides, F.M.J., Silveira, C.S., Almeida, R.M.R.,  
442 Bagueira, R.A., 2017. PERSONAL COMPUTER-BASED DIGITAL  
443 PETROPHYSICS. *Rev. Bras. Geofísica* 35, 95–107.  
444 <https://doi.org/10.22564/rbgf.v35i2.891>
- 445 Makarynska, D., Gurevich, B., Ciz, R., Arns, C.H., Knackstedt, M.A., 2008. Finite element  
446 modelling of the effective elastic properties of partially saturated rocks. *Comput.*  
447 *Geosci.* 34, 647–657. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2007.06.009>
- 448 Mavko, G., Mukerji, T., Dvorkin, J., 2003. *The Rock Physics Handbook: Tools for Seismic*  
449 *Analysis of Porous Media*, in: *Stanford-Cambridge Program*. Cambridge University  
450 Press, pp. 21–81.
- 451 Reif, J., Rajasekaran, S., 2008. *Handbook of Parallel Computing: Models, Algorithms, and*  
452 *Applications*, First Edit. ed. Chapman & Hall/CRC Computer and information science

- 453 series.
- 454 Roberts, A.P., Garboczi, E., 2000. Elastic Properties of Model Porous Ceramics. *J. Am.*  
455 *Ceram. Soc.*
- 456 Roberts, A.P., Garboczi, E.J., 2002. Computation of the linear elastic properties of random  
457 porous materials with a wide variety of microstructure. *Proc. R. Soc. A Math. Phys.*  
458 *Eng. Sci.* 458, 1033–1054. <https://doi.org/10.1098/rspa.2001.0900>
- 459 Slaughter, W.S., 2002. *The Linearized Theory of Elasticity*. Birkhäuser Boston, pp. 387–426.
- 460 Tiab, D., Donaldson, E.C., 2012. *Petrophysics: Theory and Practice of Measuring Reservoir*  
461 *Rock and Fluid Transport Properties*, in: *EngineeringPro Collection*. Elsevier Science,  
462 pp. 554–660.
- 463 Trefethen, L.N., Bau, D., 1997. *Numerical Linear Algebra*, in: *Other Titles in Applied*  
464 *Mathematics*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market  
465 Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), pp. 293–303.
- 466 Ulrich, D., Van Rietbergen, B., Weinans, H., Regsegger, P., 1998. Finite element analysis of  
467 trabecular bone structure: A comparison of image-based meshing techniques. *J.*  
468 *Biomech.* 31, 1187–1192. [https://doi.org/10.1016/S0021-9290\(98\)00118-3](https://doi.org/10.1016/S0021-9290(98)00118-3)
- 469 van Rietbergen, B., Weinans, H., Huiskes, R., Odgaard, A., 1995. A new method to  
470 determine trabecular bone elastic properties and loading using micromechanical finite-  
471 element models. *J. Biomech.* 28, 69–81. [https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0021-](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0021-9290(95)80008-5)  
472 [9290\(95\)80008-5](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0021-9290(95)80008-5)
- 473