

SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO NO INTERIOR DE UMA CAVIDADE 3D EMPREGANDO PROCESSAMENTO PARALELO.

Rubens Campregher

campregher@mecanica.ufu.br

Wellington Marinho

wellmarinho@yahoo.com.br

Aristeu da Silveira Neto

Faculdade de Engenharia Mecânica – FEMEC

Av. Joao Naves de Avila, 2160

38400-902 - Uberlândia, MG

aristeus@mecanica.ufu.br

Sérgio Said Mansur

Universidade Estadual Paulista – UNESP

Campus de Ilha Solteira

15385-000 - Ilha Solteira, SP

mansur@dem.feis.unesp.br

Resumo: *O escoamento de fluidos no interior de cavidades é um fenômeno muito estudado pois permite a validação de diversas técnicas computacionais empregadas em simulações numéricas. Além disso, apesar de sua geometria extremamente simples, é capaz de fornecer interessantes dados a respeito das interações entre as diversas estruturas que compõem um escoamento desta classe. Somando-se a todas estas importantes vantagens, a simulação em cavidades tridimensionais amplia a gama de fenômenos observáveis, aproximando-se, ainda mais, dos processos reais. Entretanto, a dimensão característica das estruturas presentes no escoamento torna-se cada vez menor à medida que o número de Reynolds aumenta, fazendo-se necessário o refinamento progressivo do domínio computacional. O presente trabalho situa-se neste contexto, buscando nas técnicas de processamento paralelo, simular cavidades com alta densidade de células. O domínio computacional foi discretizado pela técnica dos Volumes Finitos, com interpolações de segunda ordem no espaço (diferenças centradas) e no tempo (three-time level). Foi empregado o SIMPLEC como acoplamento pressão-velocidade e o código foi escrito em linguagem Fortran90, com a biblioteca de paralelização MPICH.*

Palavras-chave: *Mecânica dos Fluidos Computacional, 3D Lid-driven cavity, MPI, Processamento paralelo.*

1. INTRODUÇÃO

O escoamento incompressível no interior de cavidades fornece um rico material para a validação de códigos numéricos que pretendem resolver as equações que regem a dinâmica dos fluidos. Sabe-se que, apesar da simplicidade geométrica do domínio, a interação entre as estruturas presentes nesta classe de escoamentos é capaz de promover padrões turbilhonares extremamente complexos (Sheu & Tsai, 2002).

Neste tipo de configuração, o movimento da tampa induz, devido às tensões viscosas, um movimento na camada de fluido adjacente, dando origem ao escoamento. É possível realizar simulações em uma cavidade que não seja quadrada, apesar desta configuração ser a mais comum. O principal parâmetro a ser considerado é o número de Reynolds que, para uma cavidade quadrada, pode ser definido como:

$$Re = \frac{\rho U_{lid} H}{\mu} \quad (1)$$

onde ρ e μ são, respectivamente, a densidade e a viscosidade dinâmica do fluido. A dimensão H é a altura da cavidade e U_{lid} é a velocidade da tampa da caixa, como poder ser visto na Fig.(1).

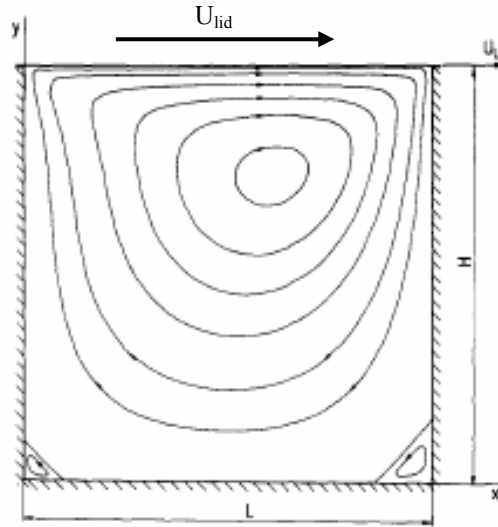


Figura 1: Definições do problema da cavidade.

Para número de Reynolds da ordem de 100, nota-se a presença de um grande turbilhão primário no centro da cavidade e de dois turbilhões secundários, formados à jusante e à montante da parte inferior da cavidade. A valores maiores de Re , aparece uma bolha de separação terciária na parte superior da parede vertical à jusante.

2. MODELAGEM NUMÉRICA

2.1 Equações Governantes

Sabe-se que as equações de Navier-Stokes são capazes de representar bastante bem o movimento de fluidos na maioria dos escoamentos encontrados na prática. No presente problema, as equações da conservação da quantidade de movimento e de massa podem ser simplificadas, como se segue, ao considerarmos o escoamento como incompressível, isotérmico e sem o efeito de forças de corpo (Ferziger & Perić, 1999):

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo da Eq. (2) é conhecido como termo transiente, o segundo termo é o termo advectivo. O primeiro termo do lado direito é o gradiente de pressão e os termos restantes são os termos difusivos.

Devido à natureza fortemente não-linear das equações de Navier-Stokes, a sua discretização ou seja, a sua transformação de um domínio contínuo para um domínio discreto, pode resultar em perdas significativas na ordem de aproximação das suas derivadas temporais e espaciais, levando à resultados numéricos não condizentes com dados experimentais. Em particular, os termos advectivos, que são naturalmente não-lineares, podem conduzir a difusividades numéricas quando discretizados por funções de interpolação com erros de truncamento. Tais viscosidades artificiais tendem a inibir a formação de vórtices e, para regimes mais elevados de escoamento, a transição à turbulência (Maliska, 1996). O prejuízo quanto à qualidade da solução numérica para estas situações é considerável.

Tratando-se de escoamentos a baixos Reynolds, a captura de todos os fenômenos físicos envolvidos, ou da maior parte deles, encontrados no escoamento pode ser feita empregando-se malhas suficientemente refinadas. Porém, à medida que o regime de escoamento aumenta (ou seja, o número de Reynolds torna-se mais elevado), o número de graus de liberdade presente no seio do fluido torna-se demasiadamente elevado, tornando-se obrigatório o uso de malhas extremamente refinadas. Assim, surge a impossibilidade de se simular completamente esta classe de escoamentos apenas pela solução das equações que o regem, abrindo espaço para técnicas de modelagem da turbulência. A idéia do presente trabalho é mostrar o emprego bem sucedido de recursos computacionais capazes de realizar simulações numéricas de escoamentos incompressíveis em domínios tridimensionais discretizados com alta densidade de malhas.

Na Fig. (2) é possível observar um desenho esquemático representando o domínio computacional em forma de cubo, empregado na simulação da cavidade tridimensional. Cada uma das dimensões H do domínio foi subdividida em $(n-2)$ volumes que, juntamente com os pontos coincidentes nas paredes laterais, perfazem n células computacionais para cada dimensão. Assim, o cálculo da quantidade de células empregadas na discretização da cavidade é dado por n^3 .

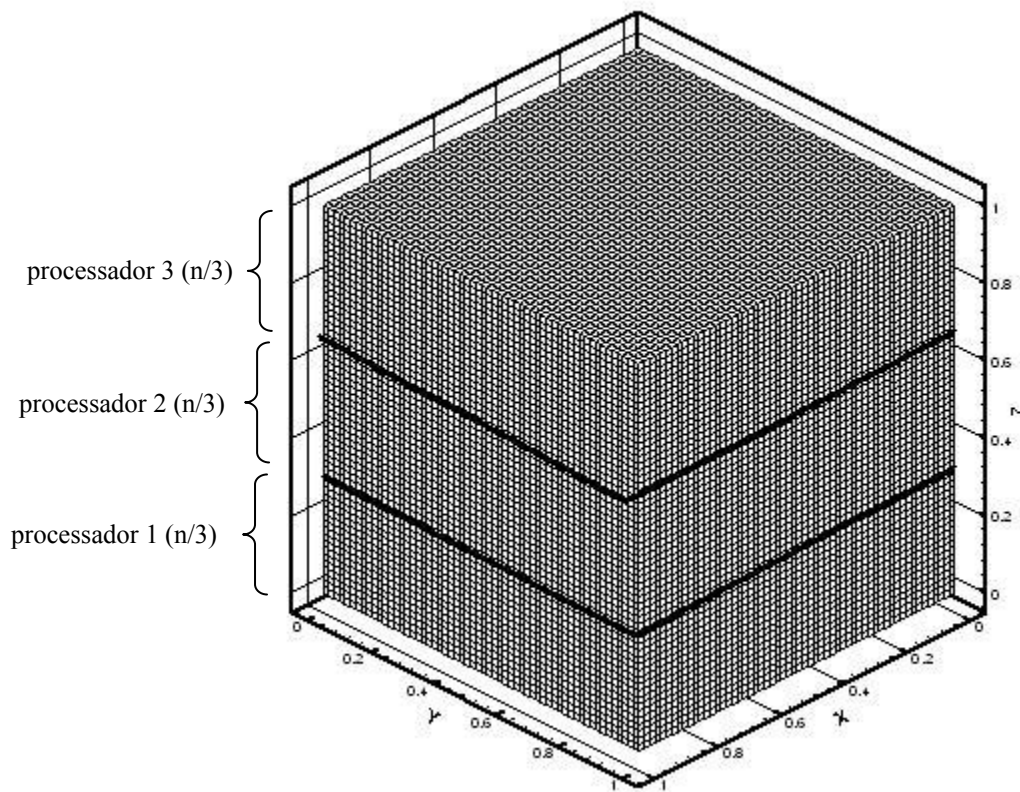


Figura 2: Layout do domínio computacional tridimensional.

Devido à impossibilidade, até o presente momento, de se obter a solução analítica para casos generalizados das Eqs. (2) e (3), emprega-se uma aproximação numérica para cada uma das células elementares que constituem o domínio discreto. No presente trabalho, as equações que regem o escoamento foram integradas sobre um volume elementar no espaço e no tempo. As três componentes do vetor velocidade (U , V e W) estão armazenadas nas faces do Volume de Controle, enquanto que a pressão (P) e as propriedades do fluido (densidade e viscosidade) estão armazenadas no centro. A aproximação dos termos advectivos foi feita por diferenças centradas (*Central Difference Scheme*), ou seja, uma aproximação de segunda ordem no espaço, isenta de difusão numérica. Entretanto, optou-se por empregar a técnica de *deferred correction*, onde uma aproximação de ordem mais baixa é calculada de forma implícita e uma diferença entre um termo de alta e um termo de baixa ordem é inserida explicitamente via termo-fonte. A aproximação temporal foi feita por *three-time level*, que significa o emprego de informações no mesmo instante de tempo considerado e de dois instantes anteriores.

2.2 Paralelização do Código Computacional

As técnicas de computação distribuída ganharam terreno a partir da década de 90 com o advento das modernas bibliotecas de paralelização e, tanto quanto se possa vislumbrar no futuro, o emprego deste recurso continuará em expansão (Baker & Smith, 1996). Entretanto, esta nova abordagem dos problemas numéricos requer do programador, além de conhecimento técnico sobre os recursos de software e hardware, uma mudança no paradigma de acompanhamento serial das instruções executadas pelo algoritmo. Em outras palavras, é de suma importância que o pesquisador passe a pensar “em paralelo”.

Cabe ressaltar ainda que a taxa de crescimento do poder de processamento de minicomputadores, mainframes e dos supercomputadores está da ordem de 20% ao ano, enquanto que o poder de processamento dos microcomputadores (os tradicionais PCs) está da ordem de 40% (Alves, 2002). Nesse contexto, aliado à melhora significativa na tecnologia das redes locais, tanto em equipamentos quanto em softwares, permitiu o surgimento de várias tecnologias para a paralelização de computadores. Dentre essas tecnologias, a que obteve maior repercussão mundial foi a Beowulf, desenvolvida na NASA em 1994, sendo a empregada no Laboratório de Transferência de Calor e Massa (LTCM) da FEMEC.

A arquitetura de máquinas interligadas Beowulf caracteriza-se por empregar máquinas baratas, de fácil acesso e de softwares de domínio público. O cluster, composto de três máquinas Pentium® IV de 1.7 MHz e 256 Mbytes RAM, do LTCM roda sob o sistema operacional Linux, o código computacional foi escrito em linguagem Fortran 90, compilada pelo IFC (Intel Fortran Compiler) e emprega a biblioteca de paralelização MPICH. A Fig. (3) apresenta o diagrama esquemático de um cluster Beowulf.

No código computacional empregado neste experimento, a divisão entre os domínios computacionais deu-se ao longo da coordenada z , conforme pode ser visto na Fig. (2). Segundo a divisão empregada, cada um dos processadores resolveu uma quantidade $n^3/3$ de equações lineares.

Empregando-se a divisão do domínio no eixo z e o arranjo deslocado das componentes das velocidades no volume, surge um interessante impasse no acoplamento da velocidade W entre os domínios. Em um problema simulado num único processador (processamento serial), o primeiro plano simulado inicia-se no segundo volume ($k = 2$), terminando no antepenúltimo volume ($k = nz - 2$). Ao se dividir o domínio computacional, a componente da velocidade coincidente com o eixo do corte do domínio não pode mais abranger todos estes planos. A explicação para isto pode ser encontrada no fato de que, resolvendo-se até o antepenúltimo plano do domínio inferior e reiniciando-se os cálculos no segundo plano do domínio superior, aparece uma lacuna, ou seja, um plano não resolvido entre eles, conforme pode ser visto na Fig. (4).

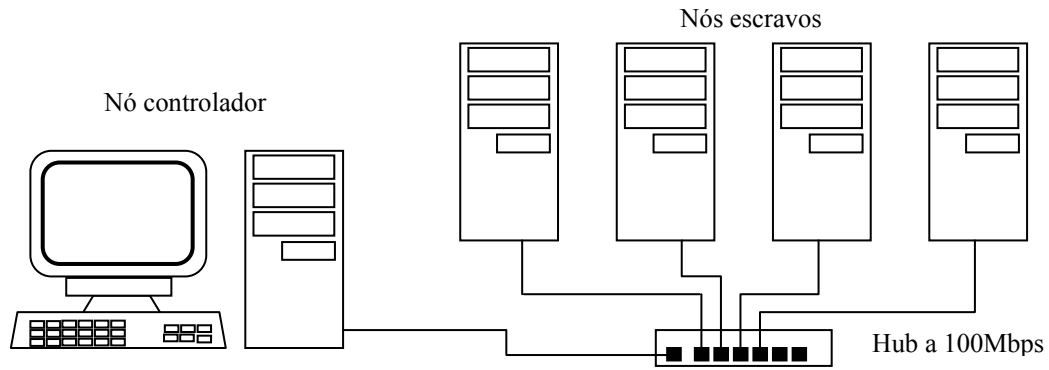


Figura 3: Diagrama de conexões em um cluster de PCs.

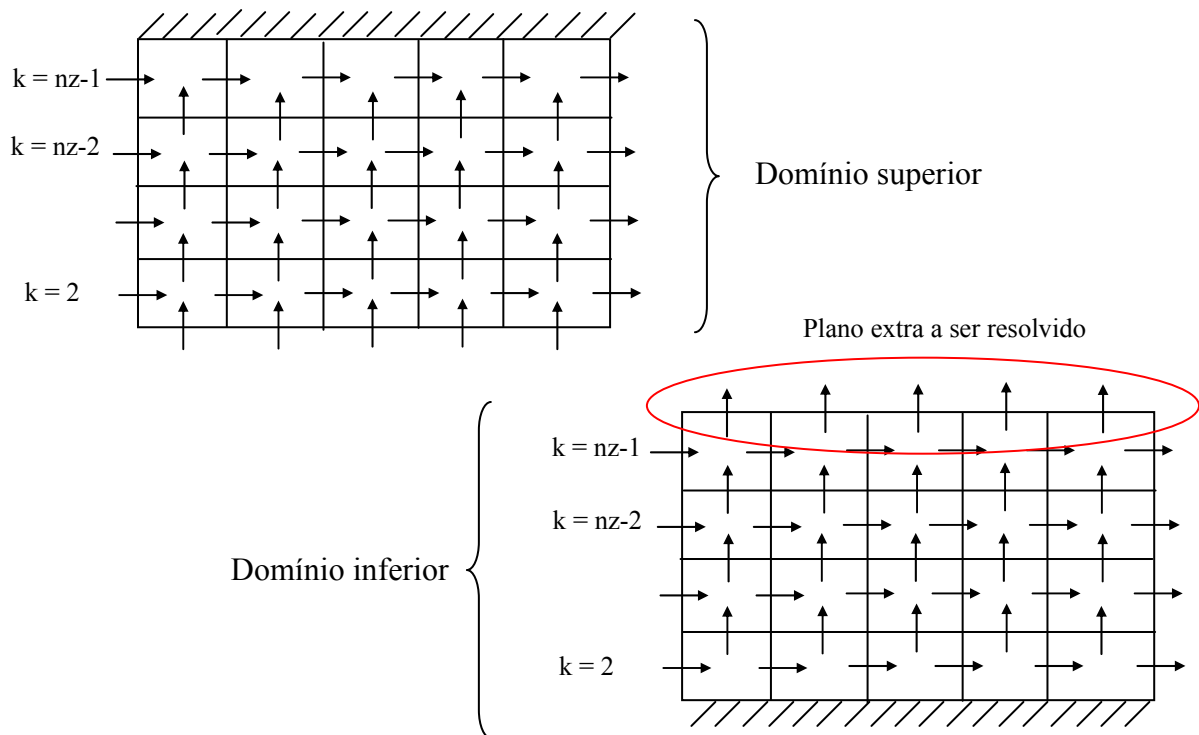


Figura 4: Malha dividida no processamento paralelo.

Este plano não resolvido pode ser entendido como sendo o penúltimo do domínio inferior, ou o mesmo o primeiro do domínio superior (pois são interligados pela troca de mensagens entre os processadores). Dessa forma, para o perfeito acoplamento entre os domínios, este plano “extra” deve ser contemplado. A inclusão destas variáveis é feita aumentando-se um plano de solução ao sistema linear. Uma vez tendo sido resolvido, o penúltimo plano é passado como condição de contorno a ser utilizada pelo segundo plano do domínio superior. Cabe ressaltar aqui que este procedimento faz-se necessário apenas ao se tentar resolver a componente da velocidade coincidente com o eixo de corte do domínio. Para as demais componentes da velocidade e para as variáveis localizadas no interior do volume de controle, os sistemas lineares resultantes da discretização de todos os domínios possuem, rigorosamente, o mesmo tamanho.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As condições de contorno para as variáveis são de $U = V = W = 0$ em todas as paredes do domínio, exceto na face $X = 1.0$, onde é imposto um valor de $V = U_{lid}$ para a tampa. As dimensões (H) empregadas na cavidade são de $1 \times 1 \times 1$ m, a velocidade da tampa (U_{lid}) foi de 1.0 m/s, a densidade do fluido $\rho = 1.0 \text{ kg/m}^3$ e a viscosidade $\mu = 0.001 \text{ kg/ms}$ e um passo de tempo $\Delta t = 0.001$ s. Para estas condições, o número de Reynolds característico do escoamento, calculado a partir da Eq. (1) foi de $Re = 1000$. Para cada uma das três máquinas do cluster, foram empregadas três densidades diferentes de grades para o domínio: 44^3 (totalizando 85 148 volumes), 62^3 (238 328 volumes) e 104^3 (1 124 864 volumes). O tempo físico de simulação foi de 10s para todos os ensaios.

A Tabela (1) resume os resultados obtidos para as diferentes combinações de tamanho de malha, número de processadores, tempo total consumido nos cálculos e o ganho com a paralelização (em relação ao problema serial). Cabe ressaltar que não há resultados para a malha de 104^3 para um único processador pois essa combinação consumiria um tempo computacional excessivo. Dessa forma, os cálculos do ganho para esta configuração geométrica ficaram restritos àqueles com três processadores, já que o padrão de comparação coube ao ensaio com dois processadores. Entretanto, em uma estimativa grosseira, poderíamos estimar o tempo em 140 horas, o que resultaria num ganho de aproximadamente 70%.

Tabela 1: Tempos totais consumidos nos cálculos.

malha	qde. process.	tempo total	ganho (%)
40^3	1	2h 06min	—
	2	1h 33min	26.2
	3	1h 20min	36.5
60^3	1	9h 34min	—
	2	5h 51min	38.9
	3	4h 30min	53.0
104^3	1	—	—
	2	70h 57min	—
	3	36h 16min	48.9

É interessante notar que a taxa com que o ganho aumenta não é equivalente entre os domínios discretizados com malhas de diferentes densidades. A razão principal para isto é que, a medida que o tamanho do sistema linear a ser resolvido aumenta, o tempo para a troca de informações entre os domínios, proporcionalmente ao tempo gasto na solução, reduz-se. Para problemas relativamente pequenos, uma maior parte do tempo total de simulação foi gasto com a troca de mensagens entre os processadores. Por este motivo, os autores não recomendam o emprego de clusters na solução de problemas de pequeno porte, a não ser que se disponha de dispositivos (hardware) de comunicação entre os equipamentos de altíssima velocidade.

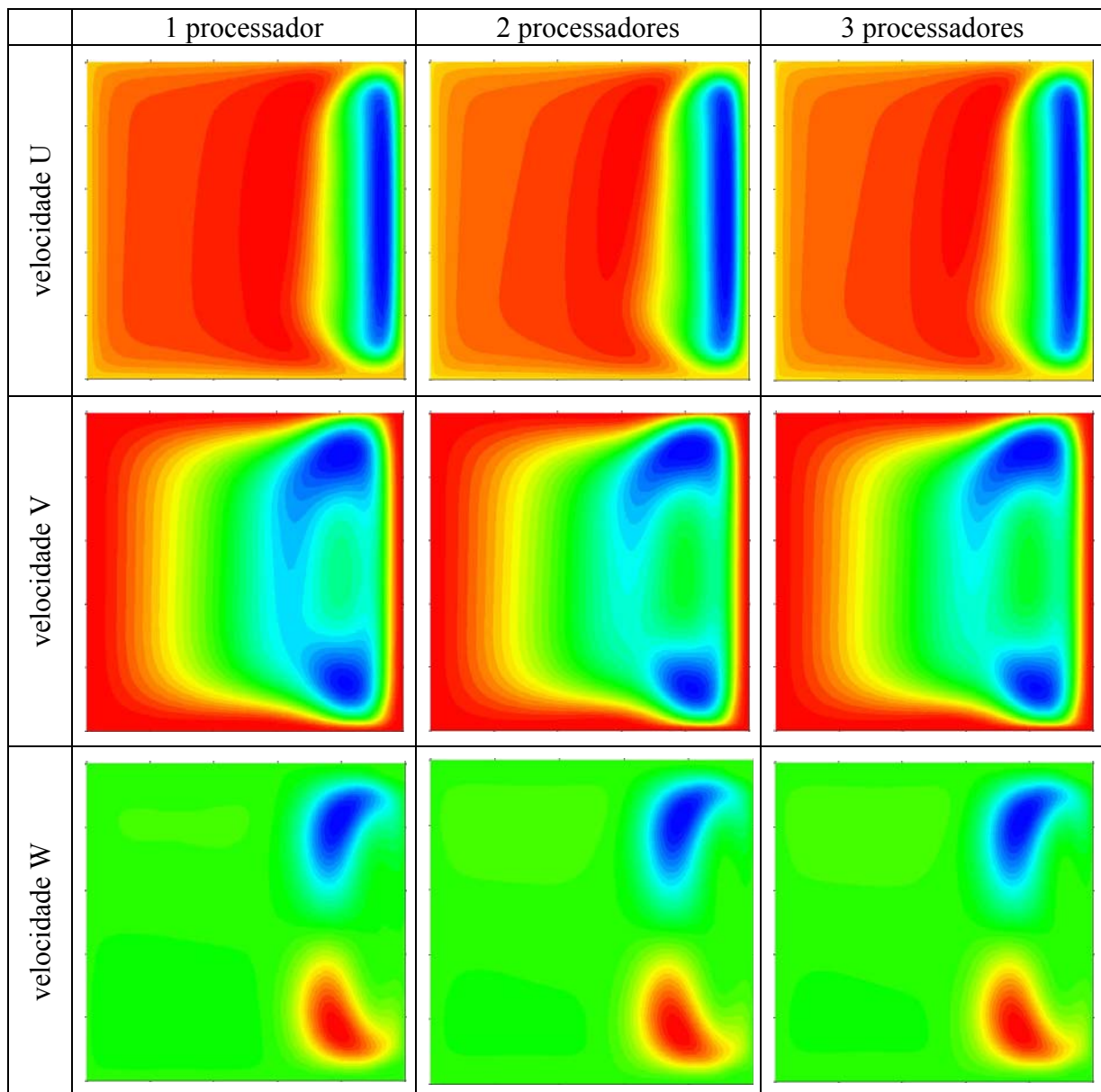
A Tabela (2) abaixo apresenta os resultados qualitativos para os campos das componentes das velocidades na configuração de 104^3 volumes. Pode-se perceber a perfeita junção entre os domínios, simulados separadamente nas máquinas. O resultado apresentado na primeira coluna, para processamento serial, refere-se à malhas de 60^3 .

4. CONCLUSÃO

Pode-se observar, a partir dos resultados qualitativos apresentados na Tab. (2) que o código computacional resolveu, de forma satisfatória, o clássico problema do escoamento em uma cavidade confinada. Devido à grande demanda por recursos computacionais que os problemas tridimensionais frequentemente enfrentam, o emprego de técnicas de processamento paralelo faz-se cada vez mais necessária, uma vez que a maioria dos problemas práticos em engenharia não podem ser reduzidos a domínios bidimensionais.

Entretanto, o processo de desenvolvimento de um código computacional seguindo a abordagem de paralelização não é trivial. O presente trabalho pretendeu demonstrar uma das experiências bem sucedidas obtida no cluster de classe Beowulf presente no LTCM da Faculdade de Engenharia Mecânica da UFU. Deve-se ressaltar, ainda, o excelente custo-benefício do equipamento, uma vez que é constituído de microcomputadores comuns, rodando softwares de domínio público e com performances satisfatórias, comprovadas pelos resultados da Tab. (1).

Tabela 2: Resultados qualitativos para as variáveis do escoamento.



5. REFERÊNCIAS

- Alves, M.J.P., 2002, “Construindo Supercomputadores com Linux”, Rio de Janeiro, Brasport.
Baker, L. And Smith, B.J., 1996, “Parallel Programming”, McGraw-Hill.
Ferziger, J.H. and Perić, M., 1999, “Computational Methods for Fluid Dynamics”, Springer
Maliska, C.R., 1995, “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”, Rio de Janeiro, LTC Editora.
Sheu, T.W.H. and Tsai, S.F., 2002, “Flow Topology in a Steady Three-Dimensional Lid-driven Cavity”

6. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.

NUMERICAL SIMULATION OF A THREE-DIMENSIONAL LID – DRIVEN CAVITY USING PARALLEL COMPUTING

Rubens Campregher

campregher@mecanica.ufu.br

Wellington Marinho

wellmarinho@yahoo.com.br

Aristeu da Silveira Neto

School of Mechanical Engineering– FEMEC

Av. Joao Naves de Avila, 2160

38400-902 - Uberlândia, MG

aristeus@mecanica.ufu.br

Sérgio Said Mansur

São Paulo State University – UNESP

Campus Ilha Solteira

15385-000 - Ilha Solteira, SP

mansur@dem.feis.unesp.br

Abstract: *The flow inside cavities is an interesting phenomenon that can provide data for validating several numerical computational techniques commonly employed in numerical simulations. Furthermore, despite its extremely simple geometry, it furnishes interesting information about the interaction among the various different flow structures. In addition to this, the three-dimensional lid-driven cavity flow could widen these possibilities to a more practical situation. However, the flow structures size becomes smaller as the Reynolds number increases, making the mesh refinement a must. This work aims to perform numerical simulation of a lid-driven cavity flow by a high-density grid. The computational domain was discretised by the Finite-Volume technique, second-order approaches to the space and time derivatives. The pressure-velocity coupling was done by the SIMPLEC algorithm, the code was written with the Fortran 90 and MPICH message passing library.*

Keywords: *Computational Fluid Dynamics, 3D Lid-driven cavity, MPI, Parallel processing*