

DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA DE PARALELIZAÇÃO PARA MALHAS ADAPTATIVAS BLOCO-ESTRUTURADAS.

Rafael Sene de Lima; Alexandre Megiorin Roma; Aristeu da Silveira Neto.

A solução numérica de problemas complexos em mecânica dos fluidos, tais como escoamentos ao redor de geometrias complexas, escoamentos a condições extremas de temperatura, pressão ou velocidade, demandam um forte esforço de cálculo, devido à quantidade de variáveis envolvidas e ao nível precisão desejada. Sabe-se que, na solução numérica de equações diferenciais parciais, a precisão de cálculo e o custo computacional são determinados pelo refinamento da malha. Na grande maioria dos problemas a presença de malhas mais refinadas é necessária somente em uma região específica do domínio. Para problemas em regime transiente ainda existe a dificuldade de se detectar o local em que tal refinamento é necessário.

A metodologia de malhas adaptativas consiste na construção de malhas localmente refinada nas regiões do domínio em que é necessário um refinamento mais apurado, para a captura de fenômenos locais, sendo que nas regiões mais estáveis utiliza-se uma malha mais grosseira. Existem várias técnicas para refinamento localizado, porém a escolha do método deve levar em conta a facilidade de lidar com a estrutura de dados, o tempo gasto para se percorrer toda a malha e custo de armazenamento dos dados. Malhas não estruturadas oferecem maior eficiência para refinamentos localizados, porém necessitam de uma complexa estrutura de dados para lidar com as informações necessárias para a descrição da malha.

No presente trabalho, propõe-se desenvolver de uma metodologia de paralelização para malhas bloco - estruturadas, utilizando o padrão MPI (Message Passing Interface) para comunicação de dados em paralelo. O balanço de carga e o particionamento de domínio são implementados utilizando-se o pacote Zoltan (Devine et al., 2002).

Proposta por Berger e Oliger (1984), esta técnica consiste em uma aproximação para utilização de malhas adaptativas, em que faz-se uso de uma sequência de blocos de malhas estruturadas devidamente posicionados. Tais malhas são formadas por pontos onde o erro provindo da malha mais grosseira é suficientemente elevado. Este tipo de refinamento adaptativo foi estendido para escoamentos incompressíveis por Almgren et al. (1998). Roma, Peskin e Berger (1999) acoplaram esta técnica ao Método da Fronteira Imersa. Villar (2007) fez um estudo detalhado sobre escoamentos bifásicos utilizando o método da fronteira imersa e malhas adaptativas refinadas localmente.

A modelagem de escoamentos é feita por meio das equações de Navier-Stokes e pela equação da continuidade, as quais são compostas por um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não lineares. Para escoamentos em regime transiente, adiabáticos e incompressíveis, as equações de Navier-Stokes e da continuidade são dadas respectivamente por,

$$\rho \left(\frac{\partial U}{\partial t} + U \cdot \nabla U \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 U + \rho g \quad (1)$$

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (2)$$

na qual ρ e μ representam respectivamente a massa específica e a viscosidade dinâmica, propriedades físicas do fluido. As características do escoamento são dadas por: p campo de pressão, $U = (u; v; w)$ vetor velocidade e g aceleração gravitacional.

Para a discretização temporal das equações diferenciais parciais, emprega-se a mesma estratégia semi-implícita utilizada no trabalho de Villar (2007), descrita por Ascher, Ruuth e Wetton (1995). Desta forma, tem-se a discretização temporal de segunda ordem para as equações de Navier-Stokes, tal que

$$\frac{\rho}{\Delta t} (\alpha_2 U^{n+1} + \alpha_1 U^n + \alpha_0 U^{n-1}) = \theta \nabla^2 U^{n+1} + \beta_1 G_1(u^n, \mu) + \beta_0 G_0(u^{n-1}, \mu) - \nabla p^{n+1} + \rho g \quad (3)$$

$$\nabla U^{n+1} = 0 \quad (4)$$

$$G(U, \mu) = -\theta \nabla^2 U + \mu \nabla^2 U - U \cdot \nabla U \quad (5)$$

$$\theta = C_\theta \mu \quad (6)$$

Dadas as condições iniciais para as velocidades e propriedades físicas do fluido no primeiro passo de tempo, é necessário calculá-las no segundo passo de tempo. Como o Método de Gear trabalha com três passos no tempo, recorre-se ao Método de Euler para resolver as equações de Navier-Stokes no segundo passo de tempo. Para que isto seja possível, considera-se $\alpha_2 = 1$, $\alpha_1 = -1$, $\alpha_0 = 0$, $\beta_1 = 1$, $\beta_0 = 0$. A partir do terceiro passo no tempo, o Método de Gear é aplicado normalmente. Para ambos os métodos, no presente trabalho, adota-se $C_\theta = 2$. A solução das Eq. 1 é feita utilizando-se o método dos passos fracionados, proposto por Chorin (1968).

Uma das abordagens encontradas na literatura para a solução de sistemas de equações em paralelo consiste no chamado método de decomposição de domínio (MDD). O MDD é baseado no particionamento do domínio computacional em subdomínios, de modo que a solução global do problema é obtida pela combinação apropriada das soluções obtidas em cada um dos subdomínios. No presente trabalho, a paralelização do método multigrid segue o princípio básico do MDD. O domínio é particionado geometricamente e os ciclos são executados paralelamente em cada subdomínio.

A paralelização do método multigrid envolve as três componentes básicas do método: relaxação, prolongamento e restrição. No relaxador utilizado no presente trabalho (GSRB), cada iteração é composta por dois passos. No primeiro passo todos os pontos vermelhos são tratados independentemente. No segundo passo os pontos pretos são tratados utilizando os valores atualizados dos pontos vermelhos. De acordo com Trottenberg e Schuller (2001) esta característica favorece a paralelização do método GSRB.

O método empregado na paralelização do Multigrid-Multinível é validado por meio de testes de convergência para uma equação elíptica e para uma equação parabólica. Posteriormente a essas validações faz-se a validação das Equações de Navier-Stokes, onde verifica-se a conservação da massa e o comportamento do método dos passos fracionados, assim como a discretização completa das equações. Os testes de convergência foram efetuados em uma malha com dois níveis de refinamento para quatro processos, não levando em conta o balanço de carga. A malha adaptativa utilizada é apresentada na Fig. 1.

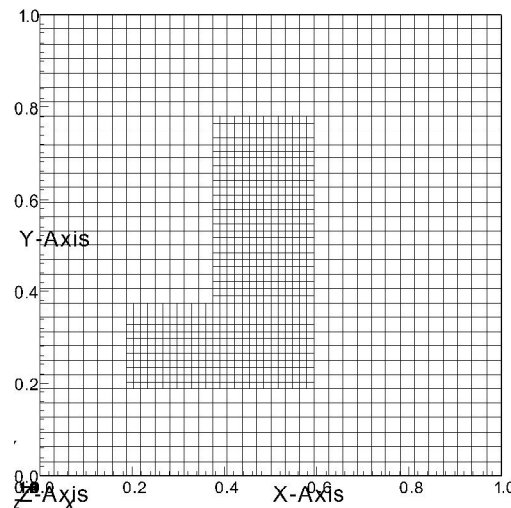


Figura 1 – Malha composta utilizada na validação do método empregado para a paralelização do Método Multigrid-Multinível

A equação elíptica utilizada para o teste de convergência é dada por,

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right) = f \quad (7)$$

na qual ρ é a viscosidade, φ é a função a ser determinada e f é chamado termo forçante, pois "força" a solução da Eq. 7 para o valor conhecido, φ_e , dado por:

$$\varphi_e = \cos^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z) \quad (8)$$

Tabela 1: Teste de convergência para malha composta utilizando condições de contorno de Dirichlet nas direções x,y,z e massa específica constante $\rho = 1$ em um domínio $\Omega[0; 1]$.

Malha base	Número de ciclos	$\ \varphi - \varphi_e\ _2$	r_e	Resíduo
16 ³ L2	14	1,1686E-6	-	2,007E-4
32 ³ L2	15	3,678E-7	3,17	6,345E-5
64 ³ L2	16	1,087E-7	3,38	1,881E-5
128 ³ L2	17	3,190E-8	3,41	5,534E-6

A equação parabólica utilizada para o teste de convergência é dada por,

$$\rho \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right) = \theta \nabla^2 U + f. \quad (9)$$

A solução da Eq. 9 é feita somente para a componente u da velocidade $U = (u, v, w)$. O valor conhecido φ_e é dado por

$$\varphi_e = \sin^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (10)$$

onde ρ_e assume valor constante $\rho_e = 1$. Os testes são realizados para um tempo final de simulação t igual a 0,1s.

Tabela 2: Teste de convergência para malha composta utilizando condições de contorno de Dirichlet nas direções x,y,z e massa específica constante $\rho = 1$ em um domínio $\Omega[0; 1]$.

Malha base	Número de ciclos	$\ \varphi - \varphi_e\ _2$	r_e	Resíduo
16 ³ L2	7	1,851E-2	-	3,710E-4
32 ³ L2	18	4,534E-3	4,08	7,977E-5
64 ³ L2	43	1,128E-3	4,02	2,879E-5
128 ³ L2	70	2,811E-4	4,01	6,651E-6

Após a validação da metodologia de paralelização para uma equação parabólica e para uma equação elíptica, parte-se para a validação das equações de Navier-Stokes. Aqui verifica-se a implementação de todo o método de acoplamento pressão-velocidade realizado pelo Método dos Passos Fracionados, bem como a convergência da velocidade nas direções x, y e z e a convergência do termo de correção de pressão, utilizando diferenças finitas centradas para a discretização espacial e o método SBDF para a discretização temporal. Para tal as seguintes funções são adotadas para as velocidades exatas (u_e, v_e, w_e) e pressão exata(p_e):

$$u_e = \sin^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (11)$$

$$v_e = \cos^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (12)$$

$$w_e = 1 \quad (13)$$

$$p_e = \cos(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (14)$$

As funções acima devem ser escolhidas de forma a garantir que $\nabla U = 0$. O termo forçante f para a componente u das equações de Navier-Stokes é dado por,

$$f = \rho \frac{\partial u_e}{\partial t} + \rho u_e \nabla u_e + \nabla p_e - \nabla(\mu_e \nabla u_e) \quad (15)$$

Tabela 3: Teste de convergência em paralelo para malha composta utilizando condições de contorno de Dirichlet para a pressão e Neumann para as velocidades nas direções x, y, z , massa específica e viscosidade constantes iguais a 1.0 em um domínio $\Omega[0;1]^3$.

Malha	p		u		v		w	
	$\ \varphi - \varphi_e\ _2$	r_e	$\ \varphi - \varphi_e\ _2$	r_e	$\ \varphi - \varphi_e\ _2$	r_e	$\ \varphi - \varphi_e\ _2$	r_e
16^3L2	1,599E-4	-	1,848E-5	-	1,862E-5	-	3,280E-6	-
32^3L2	4,856E-5	3,29	4,447E-6	4,16	4,464E-6	4,17	9,749E-7	4,04
64^3L2	1,485E-5	3,27	1,112E-6	4,00	1,114E-6	4,02	2,440E-7	3,99

Os testes são efetuados utilizando-se condições de contorno de Dirichlet para a pressão e Neumann para as velocidades, para um tempo de simulação $t=0, 1s$. Observa-se que todas as velocidades apresentam segunda ordem para convergência espacial, enquanto que a pressão apresenta no mínimo primeira ordem.

REFERÊNCIAS

- ALMGREN, A. S. *et al.* A conservative adaptive projection method for the variable density incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 142, p. 1–46, May 1998.
- ASCHER, U. M.; RUUTH, S. J.; WETTON, B. T. R. **Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations**. SIAM Journal on Numerical Analysis, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 32, p. 797–823, June 1995.
- BERGER, M. J.; OLIGER, J. **Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations**. Journal of Computational Physics, v. 53, n. 3, p. 484 – 512, 1984.
- CHORIN, A. J. **Numerical solution of the navier-stokes equations**. Mathematics of Computation, American Mathematical Society, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968.
- DEVINE, K. *et al.* **Zoltan data management service for parallel dynamic applications. Computing in Science and Engineering**, IEEE Educational Activities Department, Piscataway, NJ, USA, v. 4, p. 90–97, March 2002.
- ROMA, A. M.; PESKIN, C. S.; BERGER, M. J. **An adaptive version of the immersed boundary method**. Journal of Computational Physics, v. 153, p. 509–534, 1999.
- VILLAR, M. M. *Análise Numérica Detalhada de Escoamentos Multifásicos Bidimensionais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- TROTTEBERG, C. W. O. U.; SCHULLER, A. **Multigrid**. San Diego, CA, USA: Academic Press, 2001.