

Desenvolvimento de uma Metodologia de Paralelização para Malhas Adaptativas Bloco-Estruturadas

Rafael Sene de Lima, rafaelsene@gmail.com
Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma, roma@ime.usp.br
Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto, aristeus@mecanica.ufu.br

Resumo: O presente trabalho consiste no desenvolvimento de uma metodologia de paralelização para a solução das equações de Navier-Stokes em malhas adaptativas bloco-estruturadas (Structured Adaptive Mesh Refinement - SAMR) utilizando a interface MPI (Message Passing Interface) e o método de bisseção por coordenadas (Recursive Coordinate Bisection) para o balanço de carga. Implementações de métodos SAMR em processamento paralelo oferecem a possibilidade de simulações precisas de escoamentos de elevada complexidade. No entanto, apresentam desafios interessantes quanto à dinamicidade na alocação e distribuição dos dados e no balanceamento de carga. Cabe ressaltar que a eficiência total das aplicações envolvendo métodos SAMR em processamento paralelo é fortemente dependente da qualidade do particionamento dinâmico de domínio, efetuado em tempo de execução, para que se garanta os menores custos de comunicação e sincronização possíveis, além uma boa distribuição da carga computacional. Neste trabalho, utilizou-se o esquema semi-implícito proposto por Cenicerós et al. (2010) para avanço temporal. Todas as implementações foram efetuadas como uma extensão do código "AMR3D", proposto por Nós (2007). A eficiência e a robustez do método proposto são verificadas por meio do método das soluções manufaturadas. As validações foram feitas por meio da simulação do escoamento em uma cavidade com tampa deslizante e de um jato incompressível..

Palavras-chave: malhas adaptativas, paralelização, equações de Navier-Stokes incompressível.

1. INTRODUÇÃO

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), a 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.

2. METODOLOGIA

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,

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

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

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

$$G(U, \mu) = -\theta \nabla^2 U + \mu \nabla^2 U - U \nabla U \quad (3)$$

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 $\theta = 2\mu$. 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, *Gauss Seidel Red-Black* (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.

3. RESULTADOS

Para a validação da metodologia proposta, simulou-se o caso da cavidade com tampa deslizante para números de Reynolds iguais a 100, 400, 1.000 e 3.200. As dimensões do domínio computacional são $1m \times 1m \times 1m$, a velocidade de deslizamento da tampa é $u_0 = 1m/s$ e a densidade $\rho = 1kg/m$. A viscosidade calculada por meio do número de Reynolds, ou seja, $\mu = \rho u_0 L/Re$, onde L é o comprimento da cavidade.

Para os escoamentos a $Re = 100$ e $Re = 400$, os casos foram executados utilizando-se 16 processos, malha base $16 \times 16 \times 16$ mais dois níveis de refinamento. Para $Re = 1000$ e $Re = 3200$, utilizou-se 32 processos, malha base $32 \times 32 \times 32$ mais dois níveis de refinamento. Os resultados obtidos são comparados com os de Deshpande e Milton (1998) e Prasad e Koseff (1989) para $Re = 1000$ e $Re = 3200$ e com os de Ku, Hirsh e Taylor (1987) para $Re = 100$ e $Re = 400$. As comparações são feitas por meio do perfil da velocidade u ao longo do eixo vertical (y) da cavidade em $x/L = 0, 5$ e $z/L = 0, 5$ e do perfil da velocidade v ao longo do eixo horizontal (x) da cavidade em $y/L = 0, 5$ e $z/L = 0, 5$. O passo de tempo, determinado pela condição CFL, é da ordem do espaçamento da malha no nível mais fino, ou seja $\Delta t = O(1/64)$ para $Re = 100$ e $Re = 400$ e $\Delta t = O(1/128)$ para $Re = 1000$ e $Re = 3200$.

As figuras 1 e 2 representam os perfis das componentes de velocidade u e v para $Re = 100$, os quais apresentam boa concordância com os resultados numéricos de Ku, Hirsh e Taylor (1987). O tempo de simulação para este caso foi de 33 minutos em paralelo e 300 minutos em serial, o que leva a um ganho de aproximadamente nove vezes no tempo total de cálculo. Os perfis das componentes de velocidade u e v para $Re = 400$ estão representados nas figuras 3 e 4. Os resultados representam boa concordância com os resultados numéricos de Ku, Hirsh e Taylor (1987), exceto para os pontos de mínima velocidade v . Observa-se que estes valores são alcançados por Ku, Hirsh e Taylor (1987), os quais utilizam o método pseudo espectral de Chebyshev para a solução das equações de Navier-Stokes. O tempo de simulação para este caso foi de 40 minutos em paralelo e 420 minutos em serial, o que leva a um ganho de aproximadamente dez vezes no tempo total de cálculo. Para $Re = 1000$ os perfis das componentes de velocidade u e v apresentam uma boa concordância com os resultados numéricos de Deshpande e Milton (1998), conforme mostrado nas figuras 5 e 6. Os resultados obtidos para $Re = 3.200$ são mostrados nas figuras 7 e 8. Os perfis das componentes u e v são comparadas com os resultados experimentais de Prasad e Koseff (1989) e numéricos de Deshpande e Milton (1998). Observa-se uma boa concordância entre os resultados, exceto pelos pontos de velocidade máxima e mínima velocidade.

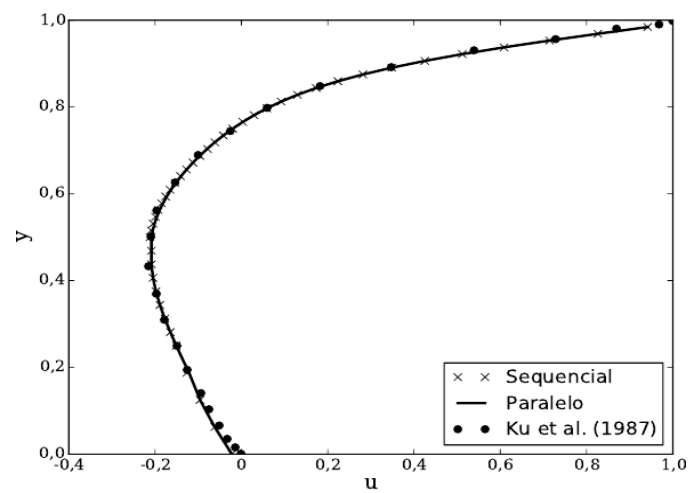


Figura 1: Perfil da componente de velocidade u para malha composta 16L3 a $Re=100$.

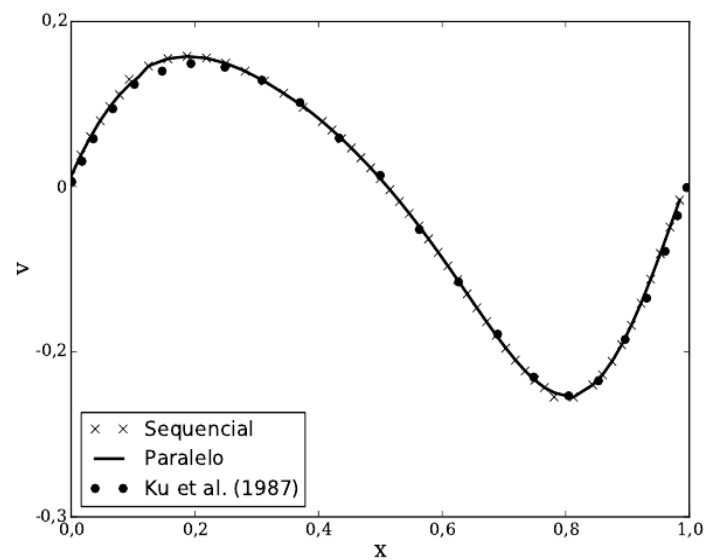


Figura 2: Perfil da componente de velocidade v para malha composta 16L3 a $Re=100$.

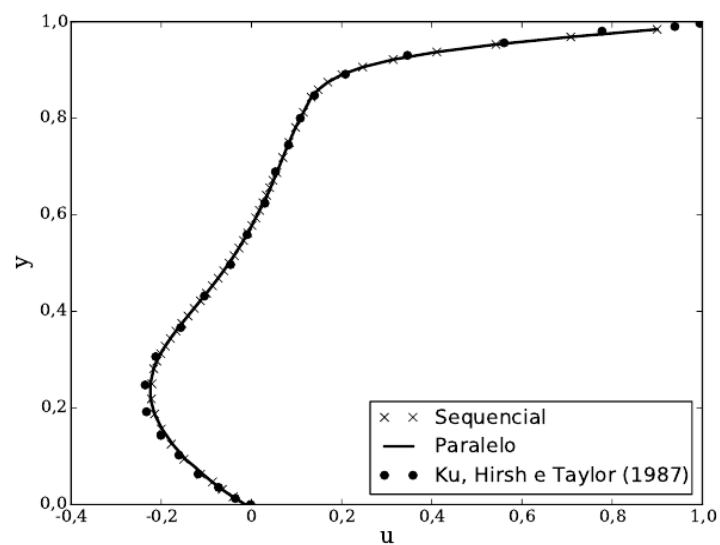


Figura 3: Perfil da componente de velocidade u para malha composta 16L3 a $Re=400$.

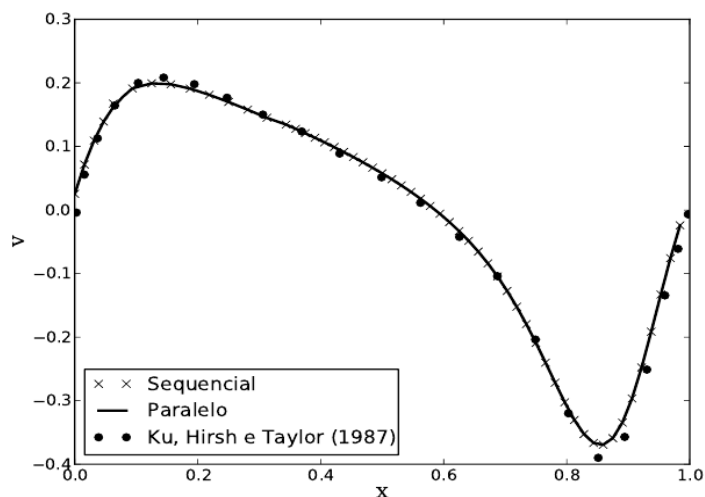


Figura 4: Perfil da componente de velocidade v para malha composta 16L3 a $Re=400$.

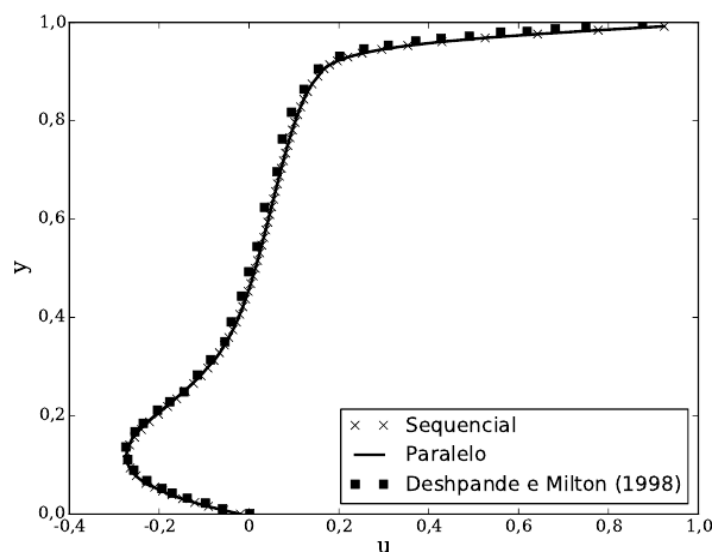


Figura 5: Perfil da componente de velocidade u para malha composta 32L3 a $Re=1000$.

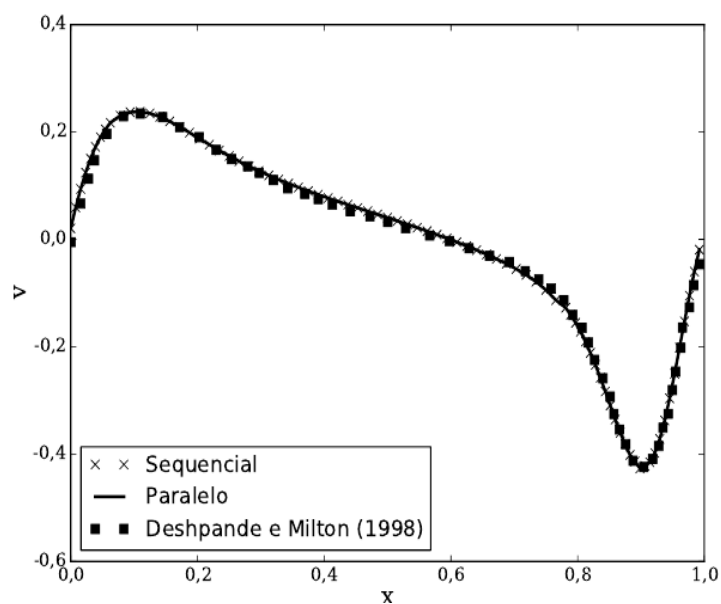


Figura 6: Perfil da componente de velocidade v para malha composta 32L3 a $Re=1000$.

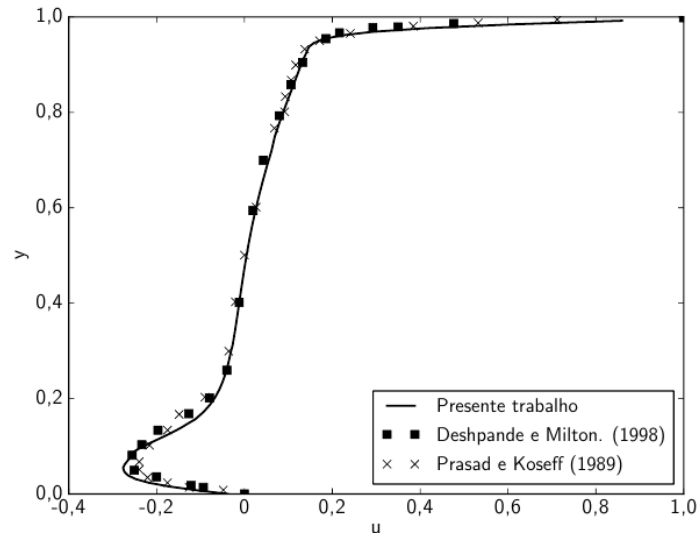


Figura 7: Perfil da componente de velocidade u para malha composta 32L3 a $Re=3200$.

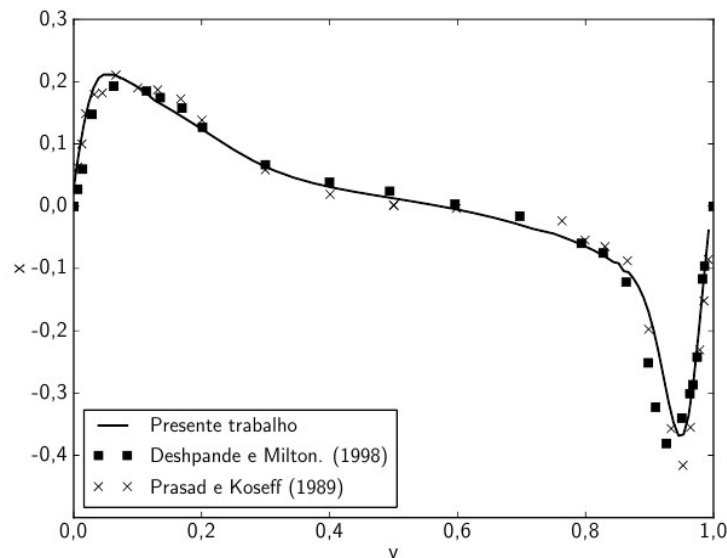


Figura 8: Perfil da componente de velocidade v para malha composta 32L3 a $Re=3200$.

A Figura 9 mostra uma sequência temporal contendo o campo de vorticidade na direção do perfil de entrada sobreposto pelo particionamento de domínio e pela malha composta. Observa-se que o refinamento concentra-se na região superior da cavidade para os instantes iniciais e distribui-se para a região inferior para os instantes finais. Tal comportamento comprometeria de sobremaneira o desempenho em paralelo caso não fosse levado em conta o particionamento dinâmico de domínio com balanço de carga.

Na Figura 10, é mostrada a evolução temporal do balanço de carga para seis instantes de tempo. Observa-se um aumento do número de células em todas as figuras, pois nos instantes iniciais da simulação as regiões de alta vorticidade concentram-se na região superior da cavidade, forçando a malha adaptativa a se concentrar nesse local. De forma geral, observa-se uma distribuição razoável da carga computacional ao longo da simulação, porém, em alguns instantes de tempo há processos que possuem carga até 50% maior que os demais processos, prejudicando o desempenho em paralelo.

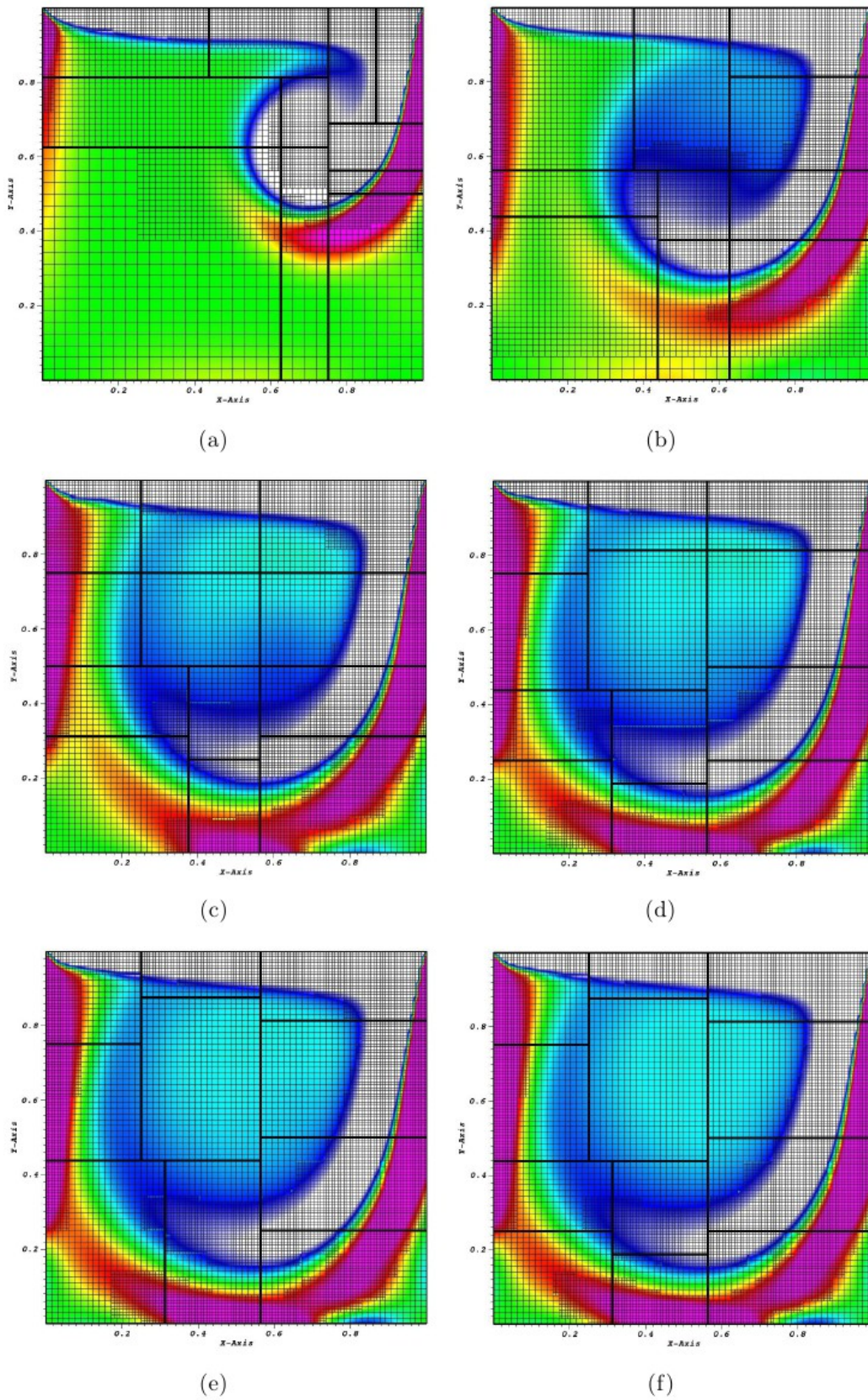


Figura 9: Evolução temporal da malha composta e do particionamento dinâmico em função da vorticidade no plano $x - y$ para $z/L = 0, 5$ na malha composta 32L3 para $Re = 1000$. (a) 9s. (b) 19s. (c) 28s. (d) 38s. (e) 44s. (f) 50s.

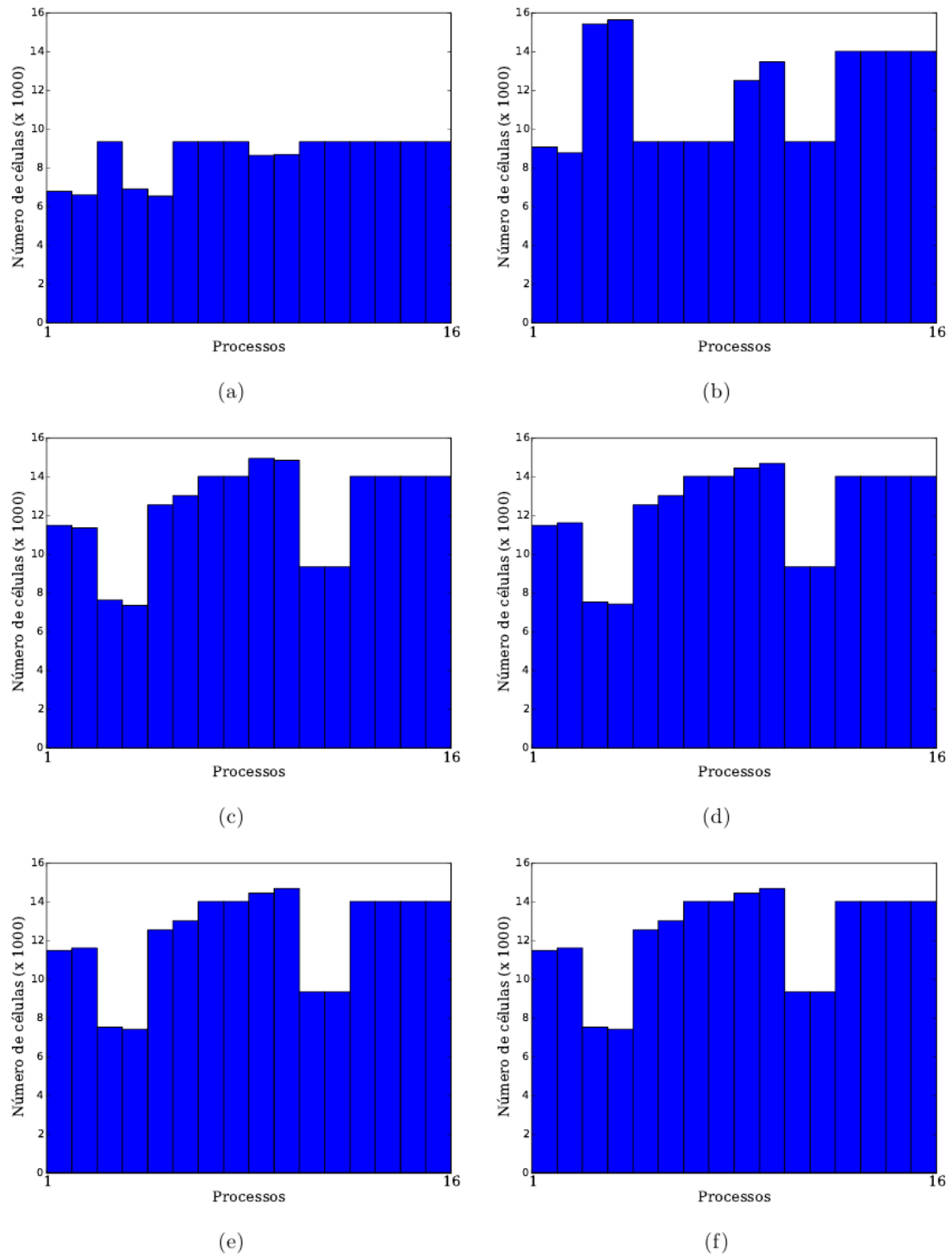


Figura 10: Evolução temporal da distribuição da carga computacional entre 16 processadores na malha composta 32L3 para $Re = 1000$. (a) 9s. (b) 19s. (c) 28s. (d) 38s. (e) 44s. (f) 50s.

4. 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.
- 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.
- CENICEROS, H. D. et al. A robust, fully adaptive hybrid level-set/front-tracking method for two-phase flows with an accurate surface tension computation. *Communications in Computational Physics*, v. 8, p. 51–94, 2010.
- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, American Mathematical Society, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968.
- DESHPANDE, M. D.; MILTON, S. G. Kolmogorov scales in a driven cavity flow. *Fluid Dynamics Research*, v. 22, n. 6, p. 359, 1998.
- 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.
- KU, H. C.; HIRSH, R. S.; TAYLOR, T. D. A pseudospectral method for solution of the three-dimensional incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 70, n. 2, p. 439 – 462, 1987. ISSN 0021-9991.
- NÓS, R. L. Simulações de Escoamentos tridimensionais Bifásicos Empregando Métodos Adaptativos e Modelos de Campo de Fase. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2007.
- PRASAD, A. K.; KOSEFF, J. R. Reynolds number and end-wall effects on a lid-driven cavity flow. *Physics of Fluids*, v. 1, p. 208–218, fev. 1989.