

Solução Numérica para Problemas de Transferência de Calor utilizando Computação Paralela

Alexandre B. Dillon, André L. Martinotto,
Adalberto A. Dornelles Filho, Ricardo V. Dorneles

Universidade de Caxias do Sul - UCS
Rua Francisco Getúlio Vargas - 1130 - CEP 95070-560
Caxias do Sul, RS, Brasil
{abdillon,almartin,aadornef,rvdornel}@ucs.br

Introdução

A análise do movimento dos fluidos tem sido objeto de estudos desde os tempos mais remotos, e por estar presente na natureza é um fenômeno que nos afeta diretamente. O escoamento de fluidos com ou sem transferência de calor está envolvido, praticamente, em todos os processos de produção de energia, nos fenômenos ambientais, nos projetos de equipamentos térmicos, na engenharia aeronáutica e aeroespacial, engenharia de reatores, bioengenharia, etc [MAL 95].

Os fenômenos relacionados com o movimento dos fluidos podem ser bastante complexos de serem estudados analiticamente. Uma alternativa para realizar a análise deste tipo de fenômeno é a simulação numérica utilizando computadores. Uma grande quantidade desses fenômenos podem ser modelados através de equações diferenciais parciais (EDPs).

As EDPs são definidas em um domínio contínuo, e em geral, não possuem solução analítica conhecida, sendo necessário o uso de métodos numéricos de discretização, como diferenças finitas ou elementos finitos, para sua aproximação em um domínio discreto. No processo de discretização o domínio é dividido em um número finito de pontos, denominado de malha. Nesses pontos os termos das EDPs são aproximados, resultando em um sistema de equações lineares ou não-lineares, que devem ser resolvidos a cada passo de tempo. Quanto maior for o número de pontos desta malha, mais próxima da solução exata estará a solução do modelo proposto, em contrapartida, maior será o custo computacional para obter a solução [FOR 2000].

Problemas de grande magnitude geram grande demanda computacional e na maioria dos casos, para se obter uma solução satisfatória, a utilização de apenas um computador pode levar um tempo muito grande. Para contornar este problema utiliza-se, cada vez mais, computação de alto desempenho e, em particular, a computação em *clusters* de PCs.

Dentro do escopo deste trabalho é realizado um estudo sobre a utilização de computação de alto desempenho na simulação de problemas de equilíbrio, e mais precisamente o problema de transferência de calor em função do tempo em um domínio bidimensional.

Modelo Desenvolvido

Para poder modelar um problema de escoamento de fluidos computacionalmente, parte-se do problema físico e cria-se um modelo matemático correspondente. Os modelos resultantes são expressos por equações que relacionam as grandezas físicas relevantes (como temperatura, pressão e densidade) entre si, para um contínuo de espaço e tempo [FOR 2000].

Um problema clássico da área de escoamento de fluidos é o da transferência de calor bidimensional que será adotado nesse trabalho. Pode-se descrever esse problema utilizando o modelo matemático representado pela equação (1):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \mu \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right). \quad (1)$$

onde $\frac{\partial T}{\partial t}$ é o termo de variação temporal, μ é o coeficiente de difusibilidade e $\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$ é o termo de difusão bidimensional.

Para obter a solução numérica da EDP é necessário, primeiramente, que o domínio físico seja discretizado. Esse processo é realizado através da geração de uma malha sobre o mesmo. De acordo com a sua estrutura as malhas podem ser divididas em: malhas estruturadas e malhas não estruturadas. Malhas estruturadas são assim chamadas por apresentarem uma estrutura, ou regularidade, na distribuição dos pontos. Já malhas não estruturadas são assim chamadas devido à ausência de regularidade na disposição dos pontos [FOR 2000]. Neste trabalho optou-se pela utilização de malhas não estruturadas pois essas são mais genéricas e apropriadas para domínios com geometrias complexas [MAL 95].

Para a geração da malha optou-se pela utilização do *Triangle* [TRI 2005] que é um programa para geração de malhas triangulares bidimensionais, desenvolvido em C por Jonathan Richard Shewchuk. Criado como parte do projeto Quake (ferramentas para simulação de terremotos) tem seu código aberto e está disponível para *download* em <http://www.cs.cmu.edu/quake/triangle.html>.

Após a geração da malha são efetuadas aproximações dos termos presentes na EDP, isto é, para cada ponto da malha obtém-se uma equação algébrica que aproxima a EDP nesse ponto. Os métodos mais utilizados para a aproximação desses termos são: o Método de Diferenças Finitas (MDF), o Método dos Volumes Finitos (MVF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF).

Neste trabalho utilizou-se o MVF, pois é o método mais adequado para trabalhar com malhas não estruturadas. O método dos volumes finitos caracteriza-se por discretizar a EDP a partir de sua integração em uma região, ou volume, do espaço de domínio. Este método vem sendo aplicado com muito sucesso no campo da dinâmica de fluidos, nas áreas de transferência de calor e transporte de fluidos nos meios porosos [MAL 95].

Os esquemas de discretização adotados neste trabalho resultam em sistemas de equações algébricas lineares (SELA) que necessitam ser resolvidas a cada passo de tempo. Os sistemas de equações gerados têm a característica de que as matrizes de coeficientes são de grande porte e esparsos. Existem, basicamente, duas classes de métodos que podem ser aplicados na resolução desses sistemas de equações: os métodos diretos e os métodos iterativos.

Os métodos diretos trabalham sobre todos os elementos da matriz de coeficientes e na ausência de erros de arredondamento em ponto flutuante, fornecem uma solução exata para o sistema, caso ela exista. Métodos diretos são inadequados para a resolução de sistemas originados de discretização de EDPs, uma vez que, de modo geral, não aproveitam a esparsidade da matriz de coeficientes e aumentam o esforço computacional para calcular a solução numérica.

Já os métodos iterativos trabalham sobre os elementos não nulos da matriz de coeficientes, realizando aproximações sucessivas da solução procurando obter uma solução satisfatória para o sistema [FOR 2000]. Por trabalharem apenas com os elementos não nulos da matriz, não necessitam de uma grande área de armazenamento. Como as matrizes de coeficientes geradas pelo modelo desenvolvido são muito esparsas serão utilizados os métodos iterativos na resolução dos sistemas lineares, mais especificamente será adotado o método GMRES (*Generalized Minimal Residual*).

Solução Paralela

Para tratar paralelamente problemas que envolvem simulação numérica, pode-se depois de gerada a malha dividi-la em n partes, sendo n o número de processadores que serão utilizados para o processamento da solução. Esta malha pode ser vista como um grafo e esta divisão da malha como um problema de particionamento de grafos. Particionar um grafo significa dividir seus vértices em k subconjuntos, tal que esses subconjuntos sejam balanceados (com o mesmo número de vértices) e que o número de arestas entre eles seja minimizado. Esta divisão tem o objetivo de designar a cada processador a tarefa de processar uma parte do domínio do problema.

Existem várias bibliotecas que implementam algoritmos de particionamento de grafos, entre as quais as mais conhecidas são: o METIS, Chaco, Jostle e Scotch. No desenvolvimento deste trabalho utilizou-se a biblioteca METIS [KAR 98]. Optou-se por essa devido à facilidade de utilização da mesma como uma biblioteca de rotinas de particionamento, o que não ocorre com os outros pacotes.

Após o particionamento do domínio a geração do sistema de equações lineares é realizada em paralelo pelos processos, isto é, gera-se um único sistema, onde cada processo gera a parte do sistema que corresponde ao seu subdomínio. Após a geração desse sistema utiliza-se um *solver* paralelo para a resolução do mesmo, no caso desse trabalho, o método GMRES paralelizado.

A paralelização de métodos de resolução de sistemas de equações é uma área com muitas pesquisas já realizadas, tendo como resultado algumas ferramentas e bibliotecas que facilitam a construção de aplicações paralelas. Alguns exemplos para a resolução de sistemas de equações são as bibliotecas PETSc, Aztec e BlockSolve. Para o desenvolvimento deste trabalho optou-se pela utilização da biblioteca PETSc [PET 2005] (*Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*) por ser uma ferramenta amplamente utilizada e por ter sido utilizada em trabalhos relacionados, como por exemplo [FRI 2004].

A biblioteca PETSc é um conjunto de ferramentas para a resolução numérica de EDPs e de problemas relacionados a aplicações de alto desempenho. Ela tem seu código aberto, e é desenvolvida e distribuída gratuitamente pelo Argonne National Laboratory e pode ser encontrada para *download* em <http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/>. Na

biblioteca PETSc são implementados vários métodos iterativos paralelizados, como por exemplo os métodos do Gradiente Conjugado e GMRES.

Conclusões e Trabalhos Futuros

A simulação de fenômenos físicos bem como o desenvolvimento de software paralelo para essa finalidade envolve diversas etapas e especialistas de diversas áreas de conhecimento, como a física, a matemática e a ciência da computação. Em cada uma dessas etapas existem disponíveis, hoje em dia, ferramentas que, quando usadas de forma adequada, podem reduzir drasticamente o tempo de desenvolvimento, bem como aumentar a confiabilidade e desempenho do software desenvolvido, permitindo o desenvolvimento de aplicações cada vez mais complexas.

O objetivo desse trabalho foi apresentar um exemplo de uma aplicação de simulação paralela e através desse exemplo apresentar as diversas etapas envolvidas no seu desenvolvimento. Apesar de a difusão de calor ser um fenômeno de modelagem simples, os passos apresentados nesse trabalho valem para a simulação de um grande número de fenômenos físicos.

Pretende-se que o trabalho aqui desenvolvido seja utilizado como material introdutório para alunos que desejem trabalhar na área de simulação, bem como para testar outras bibliotecas de particionamento, geração de malhas e métodos numéricos. Pretende-se ainda que os sistemas de equações gerados pelo modelo desenvolvido possam ser utilizados na realização de testes de desempenho no cluster Polentão do Departamento de Informática da Universidade de Caxias do Sul - UCS.

Referências

- [FOR 2000] FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica de Fluidos**. São Paulo: EDUSP, 2000.
- [FRI 2004] FRIZZO, E. J. **Uso de Bibliotecas Paralelas de Resolução de SELAS em um Modelo de Hidrodinâmica**. Caxias do Sul: [s.n.], 2004. Trabalho de Conclusão de Curso.
- [KAR 98] KARYPIS, G.; KUMAR, V. **METIS: A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-reducing Orderings of Sparse Matrices**. Disponível em: <http://www.cs.umn.edu/~karypis>. Acesso em: out. 2003.
- [MAL 95] MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro: LTC, 1995.
- [PET 2005] PETSC. **PETSc: Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation**. Disponível em: <http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/>. Acesso em: setembro 2005.
- [TRI 2005] TRIANGLE. **Triangle: A Two-Dimensional Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator**. Disponível em: <http://www.cs.cmu.edu/~quake/triangle.html>. Acesso em: agosto 2005.