

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE CONDUÇÃO DE CALOR POR DECOMPOSIÇÃO DE DOMÍNIO

Idalmis Milián Sardiña¹

Luiz Nélio Henderson²

Antônio J. Silva Neto³

Instituto Politécnico –UERJ, CP 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil

¹ imilian@iprj.uerj.br, ² nelio@iprj.uerj.br, ³ ajsneto@iprj.uerj.br

Resumo. Neste trabalho é descrita a solução da equação de transferência de calor por condução em meios unidimensionais e bidimensionais com o uso de computação paralela, que constitui uma ferramenta fundamental para a obtenção de soluções numéricas para problemas de engenharia. É empregada a biblioteca de funções MPI (Message Passing Interface), utilizada em programas que exploram a existência de múltiplos processadores baseando-se na passagem de mensagens. Como primeiro caso-teste é considerado um problema de transferência de calor transiente unidimensional. Usando uma aproximação de diferenças finitas explícita com uma técnica de decomposição de domínio, o algoritmo fica totalmente paralelizável. É também considerado um segundo caso-exemplo em um meio bidimensional homogêneo para o qual é empregada uma formulação implícita. O meio é dividido em dois subdomínios, e para os nós da malha computacional localizados na interface a temperatura no meio adjacente é tomada com um atraso de um intervalo de tempo, o que torna, o algoritmo paralelizável.

Palavras-chave: Transferência de calor, Condução, Decomposição de domínio.

1. INTRODUÇÃO

A análise da transferência de calor em meios compostos por diferentes materiais tem aplicação em vários problemas relevantes em engenharia, tais como em projeto e operação de equipamentos e instrumentos (Frías Suárez e Darias González, 1996, 1996a), ou então o cálculo do fluxo de calor em paredes compostas de edificações (Beyer e Vilhena, 1998) ou de câmaras frigoríficas (Silveira et al., 1998). O estudo do comportamento térmico de materiais compostos com o uso de processamento paralelo tem atraído muito interesse (Dallalana et al., 1998). Para poder empregar o processamento paralelo na solução de problemas de engenharia, tanto com vetorização quanto com a utilização de vários processadores, algumas técnicas têm sido desenvolvidas tais como a reordenação de nós nas malhas computacionais (Löhner, 1998) e decomposição de domínio (Tallec et al., 1998).

Silva Neto e White (1994, 1994a) resolveram um problema de escoamento de fluidos em meios porosos não saturados usando processamento paralelo. Foi tentado o uso de vetorização

com uma reordenação do tipo Red-Black (checker board), mas a complexidade inerente das equações que estavam sendo tratadas não permitiram uma vetorização adequada. Porém, o uso da decomposição do domínio permitiu o uso bem sucedido de processamento paralelo. Estes mesmos autores aplicaram com sucesso a reordenação do tipo Red-Black e a decomposição de domínio na solução de um problema envolvendo mudança de fase em um meio bidimensional (Silva Neto e White, 1994b).

Têm sido desenvolvidos recentemente softwares que permitem o uso simultâneo de estações de trabalho que estejam ligados em rede, sendo citados como exemplo: PVM-Parallel Virtual Machine (Geist et al., 1994) e MPI –Message Passing Interface (Pacheco, 1995). A biblioteca de funções MPI baseada na passagem de mensagens, é um dos primeiros padrões desenvolvidos na programação paralela (Pacheco, 1995), e é neste trabalho usada para a solução do problema de transferência de calor por condução em meios unidimensionais e bidimensionais usando estações de trabalho em paralelo. O acesso a ambientes de desenvolvimento de programas computacionais com processamento paralelo usando microcomputadores, ou estações de trabalho, permite que os pesquisadores possam testar seus códigos antes de submetê-los às máquinas paralelas propriamente ditas, onde obviamente o custo de processamento é maior (Cruz, 1998, Dallalana et al., 1998).

Dawson et al. (1991) e Dawson e Dupont (1994) desenvolveram formulações explícitas/implícitas de forma a permitir a paralelização do algoritmo de solução do problema de transferência de calor. Primeiro fizeram a decomposição do domínio, depois aplicaram uma formulação explícita (caso unidimensional) e uma combinação explícita-implícita (caso bidimensional), em diferenças finitas para os nós localizados nas interfaces dos subdomínios. Com isto conseguiram o desacoplamento dos subdomínios, podendo usar então, uma formulação implícita em diferenças finitas no interior de cada subdomínio, sendo cada um deles atribuído a um processador independente. Primeiro são calculadas as temperaturas para os nós localizados nas interfaces e depois, devido ao desacoplamento entre os subdomínios, os cálculos podem ser realizados em paralelo.

No primeiro caso-exemplo que será aqui apresentado, tem-se um meio unidimensional composto por placas. Usando uma formulação explícita em diferenças finitas o algoritmo fica totalmente paralelizável. O meio é subdividido em subdomínios, que correspondem a cada uma das placas, sendo cada um destes atribuído a um processador independente, sendo os cálculos realizados em paralelo. São apresentados resultados de speed-up (S_u) e eficiência (η).

No segundo caso-exemplo é considerado um meio homogêneo bidimensional dividido em subdomínios. É usada uma formulação implícita em diferenças finitas no interior de cada subdomínio. Como os pontos na interface dos subdomínios precisam de temperaturas em pontos no interior dos subdomínios adjacentes o algoritmo não é paralelizável. Para contornar essa dificuldade usamos uma variante do método proposto por Dawson et al (1991) e Dawson e Dupont (1994). No interior de cada subdomínio resolvemos com o método de Gauss-Seidel o sistema de equações algébricas lineares resultantes da aproximação por diferenças finitas com formulação implícita para o problema de condução de calor. Quando o nó estiver localizado na interface de dois subdomínios, a temperatura no domínio adjacente é tomada com atraso de um intervalo de tempo. Desta forma todos os subdomínios são desacoplados, permitindo o cálculo em paralelo.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

2.1 Caso Exemplo 1

Conforme representado na Fig1a, neste caso exemplo consideramos um meio composto

por três placas, onde a transferência de calor por condução acontece somente ao longo da coordenada espacial x .

Considerando que as superfícies externas do meio $x=x_0=0$ e $x=x_3$ estão isoladas termicamente, e que o contato térmico nas interfaces é perfeito, obtém-se a seguinte formulação matemática:

$$\frac{\partial^2 T_l(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{k_l} g_l(x,t) = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x,t)}{\partial t} \quad x_{l-1} < x < x_l, \quad t > 0, \quad l = 1,2,3 \quad (1a)$$

$$k_l \frac{\partial T_l(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=x_l} = k_{l+1} \frac{\partial T_{l+1}(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=x_l} \quad x = x_l, \quad t > 0, \quad l = 1,2 \quad (1b)$$

$$T_l(x,t) \Big|_{x=x_l} = T_{l+1}(x,t) \Big|_{x=x_l} \quad x = x_l, \quad t > 0 \quad l = 1,2 \quad (1c)$$

$$T_l(x,t) = T_{0l}(x) \quad x_{l-1} < x < x_l, \quad t = 0, \quad l = 1,2,3 \quad (1d)$$

com as condições de contorno em $x=x_0$ e $x=x_3$,

$$\frac{\partial T_1(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \quad x = x_0 = 0, \quad t > 0, \quad (1e)$$

$$\frac{\partial T_3(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=x_3} = 0 \quad x = x_3, \quad t > 0, \quad (1f)$$

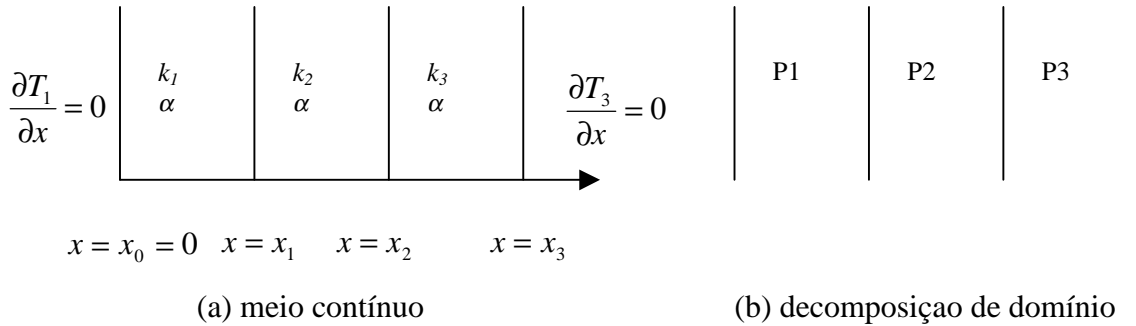


Figura 1- Meio unidimensional

onde T_l representa a temperatura no meio l , com $l=1,2$ ou 3 , k_l é a condutividade térmica, α_l é a difusividade térmica, ou seja, $\alpha_l = k_l / \rho_l c_{pl}$, onde ρ_l é a densidade e c_{pl} é o calor específico, g_l é a intensidade da fonte térmica volumétrica, e T_{0l} é a temperatura inicial do meio. Deve ser observado que cada placa que compõe o meio possui a espessura $x_l - x_{l-1}$ com $l=1,2$ ou 3 .

2.2 Caso Exemplo 2

Conforme representado na Fig.2a, neste caso exemplo é considerado um meio homogêneo bidimensional. Considerando condições de contorno dos três tipos, Dirichlet, Neumann e Robin, a formulação matemática do problema de condução de calor é dada por:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{1}{k} g(x, y, t) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} \quad 0 < x < a, \quad 0 < y < b, \quad t > 0 \quad (2a)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T - T_f) \quad x = 0, \quad t > 0, \quad (2b)$$

$$T(x, y, t) = T_c \quad x = a, \quad t > 0, \quad (2c)$$

$$T(x, y, t) = T_c \quad y = 0, \quad t > 0, \quad (2d)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad y = b, \quad t > 0, \quad (2e)$$

$$T(x, y, t) = T_0 \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b, \quad t = 0, \quad (2f)$$

3. DECOMPOSIÇÃO DE DOMÍNIO

3.1 Caso Exemplo 1

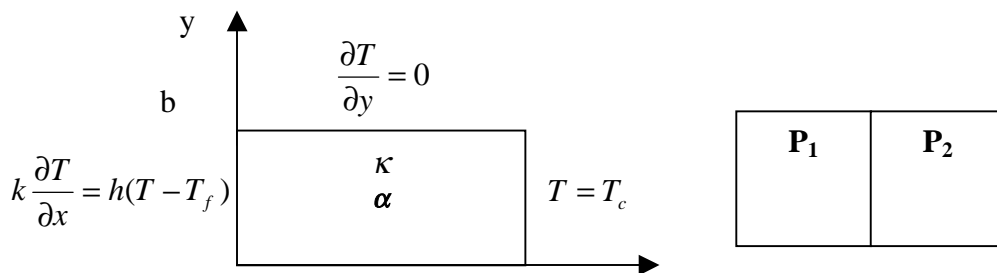
Neste caso exemplo é usada uma aproximação por diferenças finitas com formulação explícita para a solução do problema transiente, tornando o algoritmo, portanto, totalmente paralelizável. Cada placa do meio composto foi atribuída a um processador (estação de trabalho) diferente.

Na Fig. 1b é representada a decomposição de domínio utilizada e na Fig. 3a é apresentada uma representação esquemática da distribuição de tarefas nos três processadores com o uso da biblioteca MPI.

3.2 Caso Exemplo 2

Neste caso exemplo é usada uma aproximação por diferenças finitas com formulação implícita no interior de cada subdomínio. De forma a obter um algoritmo paralelizável, para o nó pertencente à interface dos subdomínios são tomadas as temperaturas dos nós no subdomínio adjacente com um atraso de um intervalo de tempo.

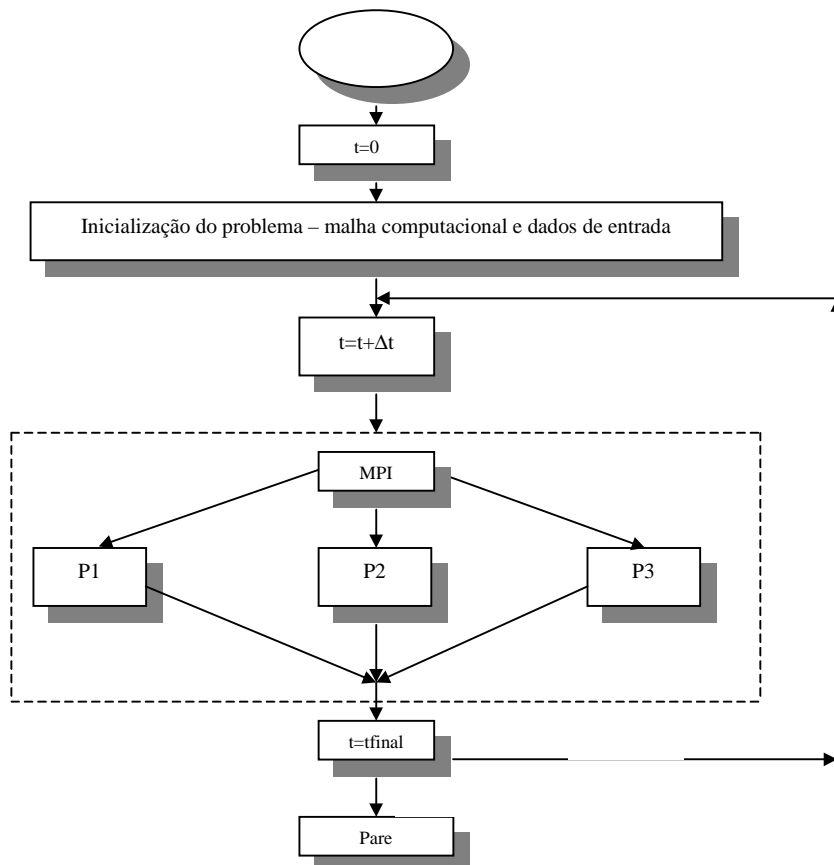
Na Fig. 2b é representada a decomposição de domínio para este caso-exemplo e na Fig. 3b é apresentada uma representação esquemática da distribuição de tarefas nos dois processadores com o uso da biblioteca MPI.



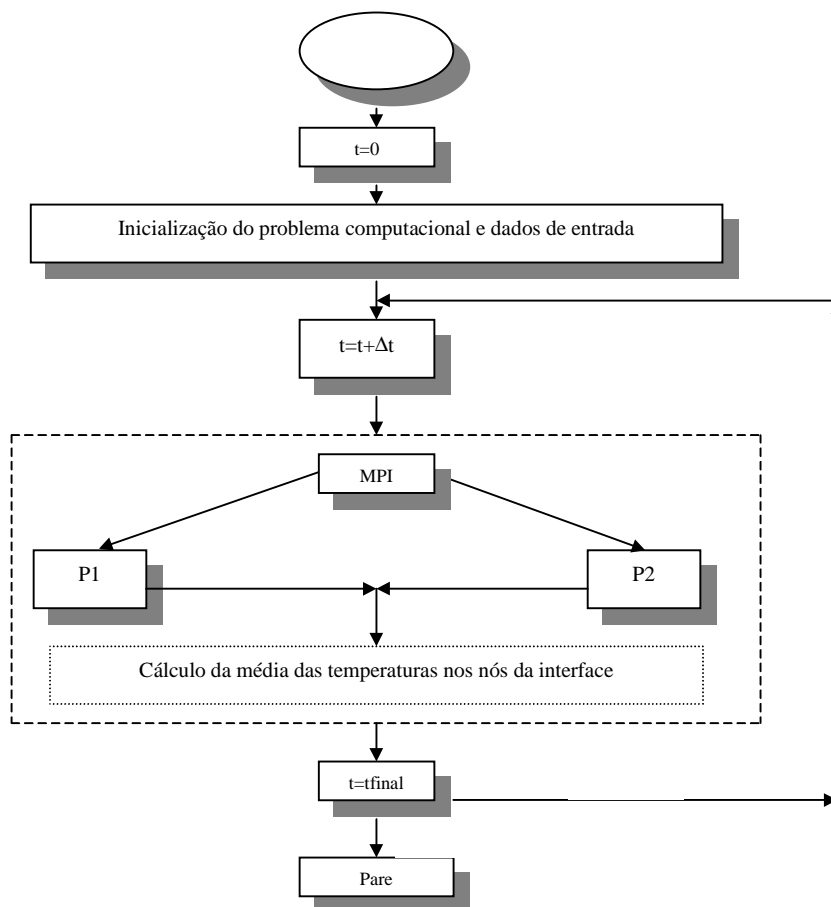
(a) meio contínuo

(b) decomposição de domínio

Figura 2- Meio bidimensional homogêneo



(a) Caso Exemplo 1



(b) Caso Exemplo 2

Figura 3- Representação esquemática da distribuição de tarefas

Deve ser observado que o nó localizado na interface entre dois subdomínios será calculado duas vezes, ou seja, uma vez em cada subdomínio. Após cada intervalo de tempo, onde os processadores calcularam em paralelo as temperaturas para os nós da malha contidos no interior dos subdomínios, e também na interface dos mesmos, é calculada uma média das temperaturas obtidas para os nós localizados na interface, antes que seja dado o próximo passo na malha temporal.

Temos aqui a preocupação da violação do balanço de energia com o procedimento proposto. São apresentados na próxima seção, resultados que comprovam que os cálculos realizados com apenas um processador e com dois processadores são muito próximos (ver Tabela 2) . Os resultados foram obtidos justamente para os nós localizados na interface de dois subdomínios, onde uma maior diferença seria esperada.

Foi realizado um segundo teste onde a temperatura na interface para o processador P₂ é sempre considerada com um intervalo de tempo de atraso, sendo calculada, portanto, apenas no processador P1. (ver Tabela 3)

Desta forma os dois subdomínios são totalmente desacoplados, não necessitando do cálculo de uma temperatura média a cada intervalo de tempo. Por este motivo o bloco que representa este cálculo na Fig. 3b possui o contorno pontilhado. Ele somente será usado no primeiro teste.

4. RESULTADOS

Antes de apresentar os resultados faz-se necessária a colocação de dois conceitos que serão utilizados a seguir. O primeiro é o speed-up (S_u) obtido com o processamento paralelo,

$$S_u = \frac{t_s}{t_p} \quad (3)$$

onde t_s , é o tempo de CPU para o cálculo feito com apenas um processador e t_p é o tempo de CPU para o cálculo feito com p processadores.

O segundo conceito é relacionado à eficiência (η) no uso de p processadores, ou seja,

$$\eta = \frac{S_u}{p} \quad (4)$$

Em uma situação ideal,

$$t_s = p t_p \longrightarrow S_u = p \longrightarrow \eta = 1 \quad (5)$$

Porém, com o uso de processamento paralelo, ocorre um custo adicional relacionado à distribuição de tarefas aos processadores. Na Fig. 3a esta atividade está representada pelo bloco MPI, e na Fig. 3b, além deste, ocorre também o cálculo das temperaturas médias na interface.

De forma genérica escreve-se,

$$t_p = t_{MPI_p} + \bar{t}_{pk} \quad (6)$$

onde

$$\bar{t}_{pk} = \max(t_{pk}) \quad k = 1, 2, \dots, p \quad (7)$$

sendo t_{pk} o tempo de processamento em cada processador e t_{MPI_p} representa principalmente o tempo para distribuição de tarefas para os p processadores.

Levando a Eq.(6) na Eq.(3) obtém-se

$$S_u = \frac{t_s}{t_{MPI_p} + \bar{t}_{p_k}} \quad (8)$$

Para que $S_u > 1$, é necessário que

$$t_{MPI_p} + \bar{t}_{p_k} < t_s \quad \longrightarrow \quad t_{MPI_p} < t_s - \bar{t}_{p_k} \quad (9)$$

Assumindo a situação limite mais simples

$$\bar{t}_{p_k} = t_{p1} = t_{p2} = \dots = t_{pp} \quad \text{e} \quad t_s = p \bar{t}_{p_k} \quad (10)$$

obtem-se

$$t_{MPI_p} < (p-1)\bar{t}_{p_k} \quad (11)$$

Para dois e três processadores obtém-se respectivamente,

$$t_{MPI_2} < \bar{t}_{p_k} \quad \text{e} \quad t_{MPI_3} < 2\bar{t}_{p_k} \quad (12)$$

Como o tempo de comunicação com a biblioteca MPI, t_{MPI_p} , é elevado, os cálculos a serem realizados por cada processador têm que ter um porte que faça com que o tempo computacional satisfaça a desigualdade (11) para que o uso de processamento paralelo seja vantajoso.

São apresentadas a seguir as tabelas com os resultados para os casos exemplo descritos nas seções 2 e 3. A Tabela 1 mostra os dados relacionados ao tempo de processamento em três testes diferentes, feitos para um processador (t_s) e para três processadores (t_p).

Dados do Caso Exemplo 1. (Para simplicidade dos testes são consideradas placas de materiais idênticos)

$L=0.07$ m (espessura de cada placa)

$g=0$ W/m³ (placas 1 e 3)

$g=10^6$ W/m³ (placa 2)

$k=21$ W/m K

$\rho=7817$ kg/m³

$c_p=460$ J/kg K

Tabela 1. Caso Exemplo 1-Meio unidimensional composto por três placas.

Teste	Δx	Δt	t_s	t_p	S_u	η
1	0.0001 m	0.0005 s	61 s	44 s	1.38	0.46
2	8.75×10^{-5} m	0.0005 s	78.6 s	47.9 s	1.64	0.55
3	7×10^{-5} m	0.0005 s	100.5 s	51 s	1.97	0.66

Dados do Caso Exemplo 2 para o teste 1. (É considerada uma malha computacional com 101x101 nós)

$a=b=0.1$ m (comprimento e largura da placa)

$g=10^6$ W/m³

$k=4$ W/m K

$\alpha=10^{-7}$ m²/s

$T_c=30$ °C

$h=1000$ W/m²°C

$T_f=100$ °C

tolerancia= 10^{-5}

$\Delta t=5$ s

$\Delta x=0.001$ m

$$t_s=567.3 \text{ s} \quad S_u=1.51$$

$$t_p=376.1 \text{ s} \quad (p=2) \quad \eta=0.75$$

Tabela 2. Caso Exemplo 2 (teste 1*) - Meio bidimensional. Comparação das temperaturas calculadas com um processador (1p) e com dois processadores (2p).

nó (i,j)	temp. (°C) - 1p	temp.(°C) - 2p
coluna 1 (i=1)		
(1,1)	140.036	140.036
(1,2)	140.034	140.035
(1,3)	140.028	140.028
....
(1,98)	73.1959	73.196
(1,99)	65.0006	65.0006
(1,100)	52.7233	52.7233
(1,101)	30	30
coluna 51 (i=51)		
(interface)		
(51,1)	356.011	356.009
(51,2)	355.993	355.995
(51,3)	355.942	355.943
...
(51,98)	59.2137	59.2138
(51,99)	49.7187	49.7187
(51,100)	39.9822	39.9822
(51,101)	30	30
coluna 100 (i=100)		
(100,1)	42.1994	42.1993
(100,2)	42.1988	42.1989
(100,3)	42.1973	42.1973
....
(100,98)	31.8505	31.8505
(100,99)	31.3257	31.3257
(100,100)	30.7253	30.7253
(100,101)	30	30

*Temperatura na interface calculada nos dois processadores (ver seção 3.2)

Dados do Caso Exemplo 2 para o teste 2. (É considerada uma malha computacional com 100x100 nós)

$a=b=0.1 \text{ m}$ (comprimento e largura da placa)

$g=10^6 \text{ W/m}^3$

$k=4 \text{ W/m K}$

$\alpha=10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

$T_c=30 \text{ }^\circ\text{C}$

$h=1000 \text{ W/m}^2\text{ }^\circ\text{C}$

$T_f=100 \text{ }^\circ\text{C}$

tolerancia= 10^{-5}

$\Delta t=5 \text{ s}$

$\Delta x= 0.0010101 \text{ m}$

$t_s= 542.2 \text{ s} \quad S_u=1.69$

$t_p= 320.5 \text{ s} \quad (p=2) \quad \eta=0.85$

Tabela 3. Caso Exemplo 2 (teste 2*). Comparação das temperaturas calculadas com um processador (1p) e com dois processadores (2p).

nó (i,j)	temp. (°C) - 1p	temp. (°C) - 2p
coluna 1 (i=1)		
(1,1)	140.051	140.049
(1,2)	140.048	140.047
(1,3)	140.042	140.04

Tabela 3 – Continuação

....
(1,97)	73.4019	73.4018
(1,98)	65.1854	65.1853
(1,99)	52.8598	52.8598
(1,100)	30	30
coluna 50 (i=50)		
(interface)		
(50,1)	356.641	356.582
(50,2)	356.623	356.567
(50,3)	356.627	356.514
...	...	
(50,97)	59.5499	59.5423
(50,98)	49.9444	49.9426
(50,99)	40.1234	40.0966
(50,100)	30	30
coluna 99 (i=99)		
(99,1)	42.3249	42.324
(99,2)	42.3243	42.3236
(99,3)	42.3288	42.322
....
(99,97)	31.8833	31.8833
(99,98)	31.3494	31.3494
(99,99)	30.7385	30.7385
(99,100)	30	30

*Temperatura na interface calculada apenas no processador P_1 (ver seção 3.2)

Os resultados apresentados nas tabelas 2 e 3 indicam que o algoritmo usando o cálculo da temperatura dos nós da interface apenas em um dos processadores (P_1) possui um desempenho um pouco superior, sem perda na qualidade dos resultados.

5. CONCLUSÕES E TRABALHO FUTURO

Os resultados apresentados na seção anterior comprovam que os algoritmos aqui propostos permitem o desacoplamento dos subdomínios em que meio é decomposto, de forma que os cálculos nos mesmos sejam realizados em paralelo sem que ocorra perda significativa de precisão. Estes foram os primeiros resultados obtidos empregando estes algoritmos. Será realizada uma investigação mais detalhada dos mesmos de forma a aplicá-los em meios bidimensionais heterogêneos, bem como em meios com propriedades térmicas dependentes da temperatura.

REFERÊNCIAS

- Beyer, P.O. e Vilhena, M.T.M.B., 1998, Fluxo de calor bi-direcional não-estacionário em meios multi-compostos, Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Vol. I, pp. 47-52.
- Cruz, M.E., 1998, Parallel computation of the transverse permeability of fibrous porous media using PVM, Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Vol. II, pp. 1243-1248.
- Dallalana, A., Costa, B.J e Cruz, M.E., 1998, Parallel microcomputing - application to heat conduction in thermal composites, Anais do V Congresso de Engenharia Mecânica N-NE, Vol. III, pp.315-322.
- Dawson, C.N, Du, Q. e Dupont, T.F. 1991, A finite difference domain decomposition algorithm for numerical solution of the heat equation, Mathematics of Computation, Vol.57, No. 195, pp. 63-71.

- Dawson, C.N e Dupont, T.F. 1994, Explicit/implicit, conservative domain decomposition procedures for parabolic problems based on block-centered finite differences, SIAM J. Numer. Anal., Vol.31, No. 4, pp. 1045-1061.
- Frías Suárez, D.G. e Darias González, J.G., 1996, Estúdio del campo de temperaturas en un sensor térmico de radiación laser, Relatório Técnico No. 3, IPRJ/UERJ.
- Frías Suárez, D.G. e Darias González, J.G., 1996a, Estúdio del comportamiento dinámico de un sensor térmico de radiación laser, Relatório Técnico No. 4, IPRJ/UERJ.
- Löhner, R., 1998, Renumbering strategies for unstructured-grid solvers operating on shared-memory, cache-based parallel machines, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, Vol. 163, pp. 95-109.
- Geist, A., Beguelin, A., Dongarra, J., Jiang W., Manchek, R. e Sunderam, V., 1994, PVM-Parallel Virtual Machine, A User's Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing, The MIT Press, Cambridge.
- Pacheco, P.S., 1995, A user's guide to MPI, Department of Mathematics, University of San Francisco.
- Silva Neto, A.J. e White, R.E., 1994, Numerical solution of Richards' equation, ARO Report 94-1, Transactions of the Eleventh Army Conference on Applied Mathematics and Computing , pp. 349-352.
- Silva Neto, A.J. e White, R.E., 1994a, Numerical Solution of fluid flow in partially saturated porous media, ARO Report 94-1, Transactions of the Eleventh Army Conference on Applied Mathematics and Computing , pp. 353-371.
- Silva Neto, A.J. e White, R.E., 1994b, Numerical control of the Stefan problem: Maximum melting, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, Vol. 113, pp. 351-362.
- Silveira, J.L., Grote, Z.V. e Travassos, S.E.P., 1998, Análise comparativa entre materiais empregados na construção de uma câmara frigorífica: styroblock e alvenaria de tijolos maciços, Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, pp. 1084-1088.
- Smir, M., Otto, S.W., Huss-Lederman, Walker, D.W. e Dongarra, J, 1996, MPI: The Complete Reference, the MIT Press, London, England.
- Tallec, P.L., Mandel, J. E Vidrascu, M., 1998, A Neumann-Neumann domain decomposition algorithm for solving plate and shell problems, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 35, No. 2, pp. 836-867.

SOLUTION OF THE HEAT CONDUCTION EQUATION WITH DOMAIN DECOMPOSITION

Abstract. *In this work the solution of the heat conduction equation in one-dimensional and two-dimensional media is described using parallel computation that consists on a fundamental tool in obtaining numerical solution for engineering problems. We have employed the library MPI (Message Passing Interface) that is used in computational codes that take advantage of the existence of multiple processors based on message passing. As a first test case we consider a one dimensional heat transfer problem. Using an explicit approximation by finite difference combined with the domain decomposition technique , the algorithm is totally parallelizable. It is also considered a second test case in a two-dimensional homogeneous medium for which an implicit formulation is applied. The medium is split in two subdomains, and for the nodes of the computational mesh located at the interface the temperatures of the adjacent subdomain are taken with one time step lag, which turns the algorithm fully parallelizable.*

Key-word: *Heat transfer, Conduction, Domain decomposition.*