

Estudo da variação dos parâmetros numéricos sobre o desempenho computacional do código Mach2D-7.0. Parte A: código geral.

Guilherme Bertoldo

11 de Setembro de 2012

Conteúdo

1	Parâmetros numéricos	1
2	Variação dinâmica de dt	1
3	Parâmetros para o controle da convergência	3

1 Parâmetros numéricos

Os parâmetros numéricos de entrada do código Mach2D-7.0 são dados na Tab. 1. Na terceira coluna desta tabela são indicados os parâmetros comuns a todas as simulações.

Tabela 1: Parâmetros numéricos de entrada do código Mach2D-7.0

Simulation identification (up to 100 characters)	sim_id	
Number of real volumes in the x direction	nx-2	
Number of real volumes in the y direction	ny-2	
Kind of grid (1=eta uniform, 2=geometric progression for eta, 3=power law)	kg	1
Initial step for the geometric progression grid (m)	a1	1.000000000E-06
Coordinate system (1=cylindrical, else cartesian)	coord	1
Perfect gas constant (J/(kg.K))	Rg	2.869000000E+02
$\gamma = C_{po} / C_{vo}$ in the chamber (Specific heat ratio)	gamma	1.400000000E+00
Stagnation pressure in the chamber (Pa)	po	1.725068000E+06
Stagnation temperature in the chamber (K)	T0	8.333300000E+02
atmospheric pressure at the sea level (Pa)	pr	1.013250000E+05
gravitational acceleration at the sea level (m/s ²)	go	9.806650000E+00
Initial constant of the UDS/CDS mixing scheme	beta1	
Final constant of the UDS/CDS mixing scheme	beta2	
beta = beta1 for it <= itb1	itb1	
beta = beta2 for itb2 <= it	itb2	
modvis = 0 -> Euler; modvis = 1 -> Navier-Stokes	modvis	0
turbulence model option (0=laminar, 1=Baldwin-Lomax)	modtur	0
ccTw = 0 -> adiabatic; ccTw = 1 -> prescribed temperature	ccTw	0
dt = dt1 for it <= it1	it1	
dt = dt2 for it2 <= it	it2	
Initial time step (s)	dt1	
Final time step (s)	dt2	
Maximum number of iterations of the time evolution	itmax	
Parada com base no valor do residuo, se negativo, a parada e feita com base no imax	tolerance	
Maximum number of iterations for the pressure correction	imax	
Maximum number of iterations for the TDMA method for u, v and T	nitm_u	
Maximum number of iterations for the TDMA method for p	nitm_p	
Upload backup data and continue computation (0 = no, 1 = yes)	reload	0
Frequency of saving backup data	wbcp	50000
Frequency of printing in the listing file and in the screen	wlf	1
1 = do not open result files, 0 = open	sem_a	1
0 = visualize the plot, 1 = do not visualize	sem_g	1
Frequency of writing data for graphics	w_g	1
1 = write the fields, 0 = do not	w_cam	1
Mostrar resultados de iteracoes na tela, 0 = nao, 1= sim	ver_tela	0
Numero de Nucleos que serao utilizados na computacao paralela	num	1

2 Variação dinâmica de dt

O estudo sobre a variação dinâmica de dt apresentado no relatório

Estudo da variação dos parâmetros numéricos sobre o desempenho computacional do código Mach2D-7.0. Parte A: código geral.

Tabela 2: Parâmetros fixos no conjunto de simulações S0062.

beta1	beta2	itb1	itb2	it1	it2	tolerance	imax	nitm_u	nitm_p
0.0	0.0	100	500	5	5	1.00E-14	2	4	2

Tabela 3: Resultados do conjunto de simulações S0062.

sim_id	nx-2	ny-2	RAM	dt1	dt2	itmax	it	tcpu
Back.001	56	20	16	5.00E-06	5.00E-05	20000	20000	2.48E+01
Back.002	112	40	19	1.00E-06	1.00E-05	20000	20000	1.03E+02
Back.003	224	80	31	8.00E-07	8.00E-06	20000	20000	4.94E+02
Back.004	448	160	77	5.00E-07	5.00E-06	20000	20000	3.84E+03
Back.005	896	320	263	1.00E-07	1.00E-06	30000	30000	3.07E+04

sim_id	Cd	Fd*	maxcu	maxcv	maxct	maxcp	maxcc	dt
Back.001	1.047043462E+00	9.770438608E-01	8.18E-01	8.18E-01	8.18E-01	9.90E-01	9.90E-01	1.36E-05
Back.002	1.016945868E+00	9.720276816E-01	8.15E-01	8.15E-01	8.15E-01	9.90E-01	9.90E-01	6.56E-06
Back.003	1.000833901E+00	9.701725855E-01	8.13E-01	8.13E-01	8.13E-01	9.90E-01	9.90E-01	3.20E-06
Back.004	9.914736245E-01	9.686359878E-01	8.15E-01	8.15E-01	8.15E-01	9.90E-01	9.90E-01	1.57E-06
Back.005	9.864693701E-01	9.677675381E-01	8.17E-01	8.17E-01	8.17E-01	9.90E-01	9.90E-01	7.76E-07

foi repetido para o esquema UDS. No presente estudo (S0062), contudo, a tolerância foi reduzida de 1E-6 para 1E-14. Os parâmetros mantidos fixos são mostrados na Tab. 2 e os resultados principais na Tab. 3. Para todos os resultados apresentados não foi possível reduzir a razão dos resíduos à tolerância prescrita, entretanto, o gráfico da razão dos resíduos como função do número de iterações indica que o processo iterativo foi realizado até que se atingisse o erro de arredondamento. Não houve mudança nos resultados para Cd e Fd* até a quinta casa decimal.

O mesmo teste foi repetido para o esquema CDS (S0061). Os parâmetros mantidos fixos são dados na Tab. 4 e os resultados principais são apresentados na Tab. 5. Para todos os resultados apresentados não foi possível reduzir a razão dos resíduos à tolerância prescrita, entretanto o gráfico da razão dos resíduos como função do número de iterações indica que o processo iterativo foi realizado até a estabilização do resíduo. Ao se comparar Cd e Fd* com os do primeiro relatório, observa-se que as diferenças tornam-se significativas a partir da terceira malha, para a qual apenas três algarismos significativos coincidem. Também observou-se (Fig. 1) que as oscilações no campo de temperatura aumentaram significativamente para a quarta malha. Na quinta malha não houve convergência para os parâmetros utilizados.

A principal conclusão é: mesmo reduzindo-se a tolerância dos resíduos, o uso do dt dinâmico não permitiu reduzir as oscilações na solução e nem utilizar malhas mais finas no caso do esquema CDS.

Tabela 4: Parâmetros fixos no conjunto de simulações S0061.

beta1	beta2	itb1	itb2	it1	it2	tolerance	imax	nitm_u	nitm_p
0.0	1.0	100	500	5	5	1.00E-14	2	4	2

Tabela 5: Resultados do conjunto de simulações S0061.

sim_id	nx-2	ny-2	RAM	dt1	dt2	itmax	it	tcpu
Back.001	56	20	16	5.00E-06	5.00E-05	20000	20000	2.44E+01
Back.002	112	40	19	1.00E-06	1.00E-05	20000	20000	1.03E+02
Back.003	224	80	31	8.00E-07	8.00E-06	20000	20000	5.26E+02
Back.004	448	160	77	5.00E-07	5.00E-06	20000	20000	3.85E+03
Back.005	896	320				30000		

sim_id	Cd	Fd*	maxcu	maxcv	maxct	maxcp	maxcc	dt
Back.001	9.799088743E-01	9.648594599E-01	8.26E-01	8.26E-01	8.26E-01	9.90E-01	9.90E-01	1.37E-05
Back.002	9.808019717E-01	9.660900583E-01	8.26E-01	8.26E-01	8.26E-01	9.93E-01	9.90E-01	6.56E-06
Back.003	9.810662747E-01	9.665962511E-01	6.80E-01	6.80E-01	6.80E-01	9.95E-01	9.90E-01	1.33E-06
Back.004	9.812376961E-01	9.668064269E-01	6.20E-01	6.20E-01	6.20E-01	9.25E-01	9.90E-01	3.16E-07
Back.005								

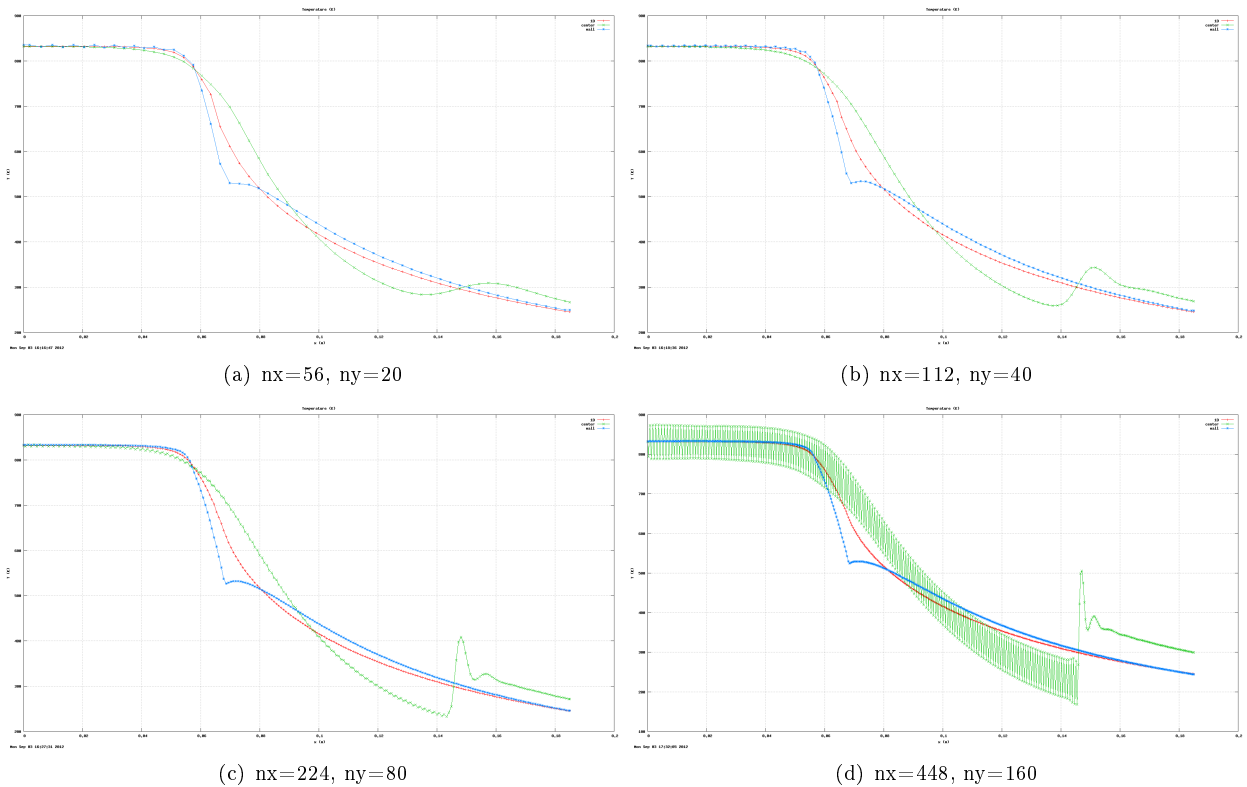


Figura 1: Distribuição de temperatura (S0061).

3 Parâmetros para o controle da convergência

Realizou-se diversas simulações com o intuito de encontrar algum parâmetro que possibilitasse variar dinamicamente o incremento de tempo dt e concomitantemente garantir a convergência e a celeridade do processo iterativo. Neste estudo três parâmetros foram testados:

1. Os coeficientes associados à diagonal dominância,

$$c^\phi = \max_P \frac{\sum_{nb} |A_{nb}|}{|A_P|}, \quad \phi \in \{u, v, T, p'\} \quad (1)$$

2. A negatividade dos coeficientes dos sistemas lineares. Conforme Maliska[2] (p. 64), a estabilidade do processo iterativo é favorecida quando os coeficientes A_{nb} do sistema linear

$$A_P \phi_P + \sum_{nb} A_{nb} \phi_{nb} = b_P \quad (2)$$

forem negativos. Para avaliar este efeito, foram definidas as variáveis

$$a^\phi = \max_{nb} A_{nb}, \quad \phi \in \{u, v, T, p'\} \quad (3)$$

3. A variação de

$$\|\phi - \phi^\circ\|_\infty, \quad \phi \in \{u, v, T, p\} \quad (4)$$

ao longo das iterações.

Os testes foram realizados para diferentes malhas e valores para dt . Também testou-se o esquema UDS e CDS. Os parâmetros de entrada variados são listados na Tab. 6. Em todas as simulações manteve-se $\beta_1=0$, $itb_1=100$, $itb_2=500$, $it_1=it_2=5$, $itmax=20000$, $tolerance=1.00E-06$, $imax=4$, $nitm_u=1$, $nitm_p=2$.

Tabela 6: Parâmetros dos conjuntos de simulações S0068-S0074.

S0068						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	56	20	0.00E+00	3.00E-06	3.00E-06	
Back002	56	20	0.00E+00	7.00E-06	7.00E-06	
Back003	56	20	0.00E+00	1.00E-05	1.00E-05	
Back004	56	20	0.00E+00	1.36E-05	1.36E-05	
Back005	56	20	0.00E+00	3.00E-05	3.00E-05	
Back006	56	20	0.00E+00	6.00E-05	6.00E-05	
S0069						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	112	40	0.00E+00	7.00E-07	7.00E-07	
Back002	112	40	0.00E+00	1.00E-06	1.00E-06	
Back003	112	40	0.00E+00	3.00E-06	3.00E-06	
Back004	112	40	0.00E+00	6.50E-06	6.50E-06	
Back005	112	40	0.00E+00	1.00E-05	1.00E-05	
Back006	112	40	0.00E+00	1.50E-05	1.50E-05	
S0070						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	224	80	0.00E+00	1.00E-07	1.00E-07	
Back002	224	80	0.00E+00	4.00E-07	4.00E-07	
Back003	224	80	0.00E+00	7.00E-07	7.00E-07	
Back004	224	80	0.00E+00	1.30E-06	1.30E-06	
Back005	224	80	0.00E+00	4.00E-06	4.00E-06	
Back006	224	80	0.00E+00	8.00E-06	8.00E-06	
S0071						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	448	160	0.00E+00	3.00E-08	3.00E-08	
Back002	448	160	0.00E+00	6.00E-08	6.00E-08	
Back003	448	160	0.00E+00	9.00E-08	9.00E-08	
Back004	448	160	0.00E+00	2.50E-07	2.50E-07	
Back005	448	160	0.00E+00	6.00E-07	6.00E-07	
Back006	448	160	0.00E+00	3.00E-06	3.00E-06	
S0072						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	56	20	1.00E+00	3.00E-06	3.00E-06	
Back002	56	20	1.00E+00	7.00E-06	7.00E-06	
Back003	56	20	1.00E+00	1.00E-05	1.00E-05	
Back004	56	20	1.00E+00	1.36E-05	1.36E-05	
Back005	56	20	1.00E+00	3.00E-05	3.00E-05	
Back006	56	20	1.00E+00	6.00E-05	6.00E-05	
S0073						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	112	40	1.00E+00	7.00E-07	7.00E-07	
Back002	112	40	1.00E+00	1.00E-06	1.00E-06	
Back003	112	40	1.00E+00	3.00E-06	3.00E-06	
Back004	112	40	1.00E+00	6.50E-06	6.50E-06	
Back005	112	40	1.00E+00	1.00E-05	1.00E-05	
Back006	112	40	1.00E+00	1.50E-05	1.50E-05	
S0074						
sim_id	nx-2	ny-2	beta2	dt1	dt2	
Back001	224	80	1.00E+00	1.00E-07	1.00E-07	
Back002	224	80	1.00E+00	4.00E-07	4.00E-07	
Back003	224	80	1.00E+00	7.00E-07	7.00E-07	
Back004	224	80	1.00E+00	1.30E-06	1.30E-06	
Back005	224	80	1.00E+00	4.00E-06	4.00E-06	
Back006	224	80	1.00E+00	8.00E-06	8.00E-06	

Dos resultados obtidos foi possível concluir que

1. $c^\phi > 0$ não necessariamente implica em divergência;
2. $a^\phi > 0$ implica em divergência;
3. A divergência do processo iterativo pode ter início mesmo com $a^\phi \leq 0$ ou $c^\phi \leq 1$. A situação é ilustrada na Fig. 2 que apresenta $\|\phi - \phi^\circ\|_\infty$ e a razão das normas dos resíduos como função do número de iterações para a simulação Back006 do conjunto S0068. Nesta simulação houve 42 iterações no ciclo temporal. Somente na primeira iteração e na penúltima ocorreu que $c^\phi > 1$ e em todas as iterações $a^\phi \leq 0$. Por

outro lado, observa-se nas partes a, b, c e d da Fig. 2, que a divergência começou efetivamente em torno da vigésima iteração. Outro aspecto curioso é que a norma dos resíduos manteve-se quase constante durante a divergência. Este é um indício de que o problema da estabilidade não está ligado somente ao solver, mas ao algoritmo do ciclo da evolução temporal. Esta ideia é corroborada por Ferziger e Peric[1] (p. 149):

“It is important to note that, if only one iteration is performed at each time step, the scheme may not retain all of the stability of the implicit Euler method.”

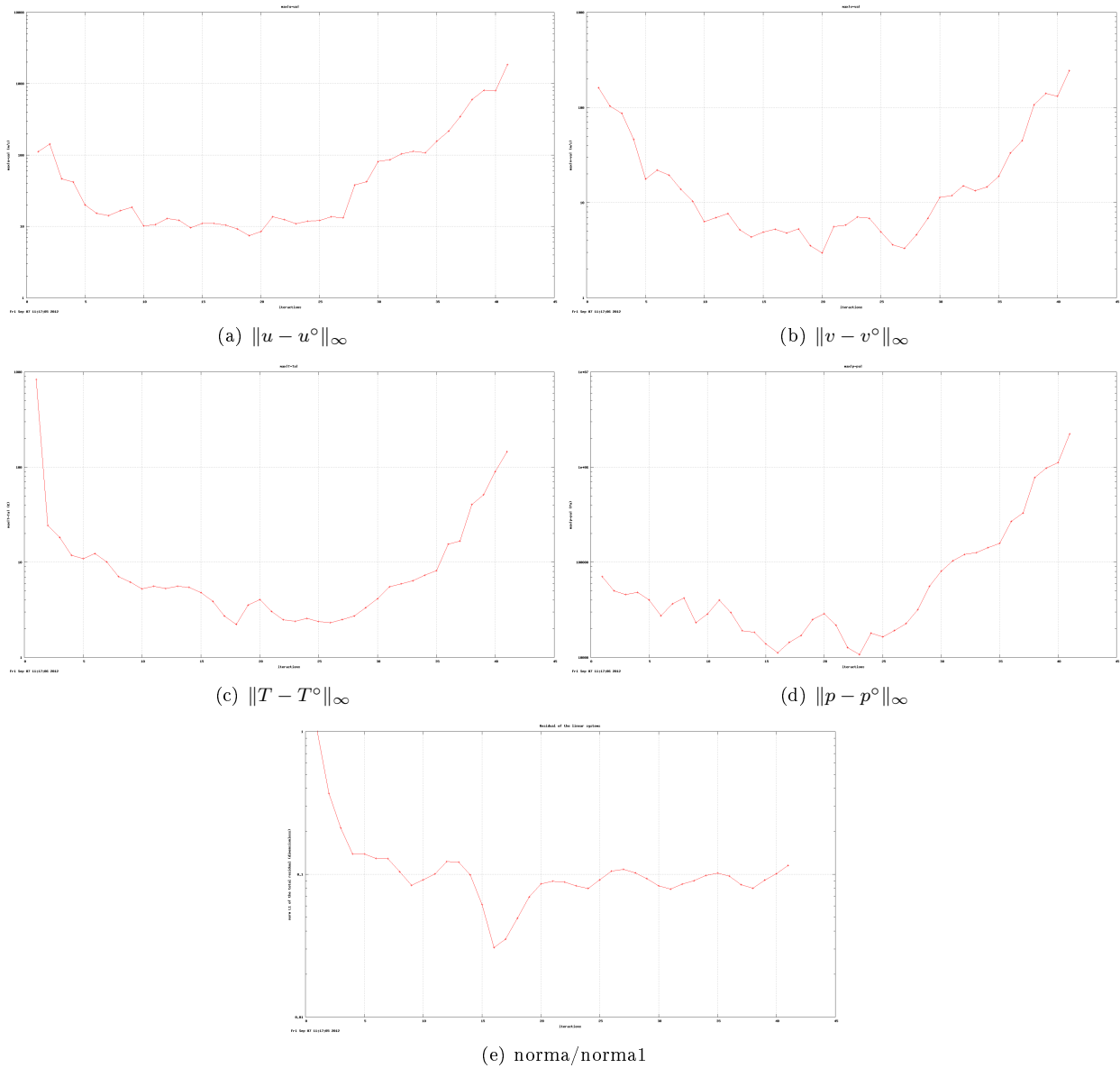


Figura 2: (S0068).

Referências

- [1] J H Ferziger and M Peric. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 3 edition, 2002.
- [2] C R Maliska. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. LTC, Rio de Janeiro, 2 edition, 2004.