

DINÂMICA DE PARTÍCULAS DE FULIGEM

André Luís Tibola¹ (FURG, Bolsista PIBIC/INPE/CNPq)
Fernando Fachini Filho² (LCP/INPE, Orientador)

RESUMO

Este trabalho, iniciado em agosto de 2010, trata-se de projeto novo que tem por objetivo estudar a resolução numérica paralela de equações diferenciais parciais que representam fenômenos envolvendo fluidodinâmica computacional e cinética química. A resolução eficiente destas é de especial importância para a reprodução computacional de fenômenos na escala que se apresentam na combustão. Especificamente objetivou-se a realização da simulação de dispersão de poluentes na atmosfera modelada pelo Danish Eulerian Model (DEM), e a reprodução de resultados bibliográficos conhecidos, realizando a paralelização do modelo em clusters de computadores utilizando a biblioteca Message Passing Interface (MPI). Embora a resolução direta do DEM seja onerosa, é possível aplicar divisões no modelo as quais levam a resolução independente de submodelos para a fluidodinâmica e as reações químicas. Neste trabalho utilizamos o método das diferenças finitas (FDM) com esquema centrado no espaço com avanço no tempo (FTCS) para a resolução da fluidodinâmica e utilizamos a Quasi-Steady-State-Approximation (QSSA) para as reações químicas. O software foi desenvolvido em linguagem C, utilizando a biblioteca MPI e as simulações envolveram oito espécies químicas, em diversos tamanhos de domínios, em duas e três dimensões, com variados intervalos de tempo; essas simulações foram realizadas utilizando-se um cluster composto por cinco computadores, cada um contendo dois processadores dual core – totalizando 20 núcleos de processamento – interligados por rede Ethernet de 1Gbit/s. Obtivemos bons resultados em termos de escalabilidade graças a realização de cálculos e comunicações simultaneamente, atingindo nas simulações com 20 núcleos velocidades próximas a 20 vezes a de um único núcleo em domínios suficientemente grandes.

¹ Aluno do curso de Engenharia de Computação – e-mail: altibola@furg.br

² Pesquisador do Laboratório de Combustão e Propulsão – e-mail: fachini@lcp.inpe.br