

Modelo lattice-Boltzmann para flujo multifásico con transferencia de calor en GPU

Argañaras Pablo E.¹, Fogliatto Ezequiel O.^{1,2}, Coronel Tomás²

¹Departamento Mecánica Computacional / CAB - CNEA

²Instituto Balseiro / Universidad Nacional de Cuyo

Av. Bustillo 9500 – San Carlos de Bariloche - Río Negro

banda@cab.cnea.gov.ar, fogliatto@cab.cnea.gov.ar, thomascoroneltuc@gmail.com

RESUMEN

En este trabajo se presentan las tareas de formación de recursos humanos y de investigación y desarrollo en la programación del modelo de lattice-Boltzmann para flujo multifásico con transferencia de calor en unidades de procesamiento gráfico (GPU) en el departamento Mecánica Computacional (Centro Atómico Bariloche) donde un estudiante del Instituto Balseiro lleva a cabo su proyecto integrador de grado para obtener el título de ingeniero mecánico. Desde el año 2019 un grupo de docentes investigadores del departamento Mecánica Computacional busca innovar en la resolución de problemas ingenieriles que emplean herramientas de cálculo numérico para modernizar los métodos empleados y maximizar el aprovechamiento de las técnicas y de las herramientas de hardware que se disponen. Las tareas involucradas permiten incorporar estudiantes de último año de ingeniería del Instituto Balseiro para formarse y generar la tesina de grado como resultado de su actividad en este proyecto. Se discutirán los recursos informáticos empleados, los ejes de investigación, los resultados obtenidos y futuros, y las producciones asociadas. Mostraremos que el uso de entornos de desarrollo colaborativos, en proyectos de investigación y desarrollo para la formación de nuevos profesionales, ayudan a compartir la realización de tareas, permitiendo incorporar nuevas formas de trabajo para docentes investigadores y estudiantes, con importantes consecuencias tales como la

valoración del trabajo colaborativo que los alumnos podrán capitalizar luego en su carrera.

Palabras clave: *lattice-Boltzmann, gpu, cuda, Python, transferencia de calor.*

CONTEXTO

Este trabajo se presenta como una línea de investigación que se relaciona con los Proyectos de investigación PICT-201-0937 denominado “Uso de herramientas numéricas para el estudio y diseño de dispositivos termohidráulicos utilizados en la industria nuclear”, y PID SIIP Tipo 1 Bienal 2019 denominado “Métodos numéricos aplicados en problemas de ingeniería y de medicina nuclear”. Este último, cofinanciado entre el Instituto Balseiro (IB) de la Universidad Nacional de Cuyo y la Comisión Nacional de Energía Atómica a través del departamento Mecánica Computacional.

El presente conforma una primera parte del Trabajo Integrador de Tomás Coronel para obtener el grado de Ingeniero Mecánico en el Instituto Balseiro, con tema y director y codirector aprobados según Resolución C.A./IB N.º 109/19. El mismo se lleva a cabo en el departamento Mecánica Computacional (Mecom a partir de ahora) del Centro Atómico Bariloche, y más precisamente en la Gerencia de Investigación Aplicada dependiente de la Gerencia de Área de Aplicaciones de la Tecnología Nuclear.

Tanto la información empleada para redactar la oferta del proyecto integrador como los datos de salida empleados para la validación de la implementación propuesta, son contenidos proporcionados por la investigación del doctorando Ing. Mgter. Ezequiel Fogliatto. La originalidad del presente trabajo se encuentra en las actividades de formación y en el desarrollo de soluciones informáticas compatibles con múltiples plataformas buscando facilitar la realización de nuevos estudios y desarrollos que ayuden a multiplicar la producción científica y tecnológica en el área de la ingeniería nuclear y mecánica, en una primera instancia.

1. INTRODUCCIÓN

El método de lattice-Boltzmann se ha convertido en una estrategia eficiente y confiable para la resolución de un amplio rango de fenómenos y procesos asociados a la mecánica de fluidos computacional. A diferencia de otras técnicas numéricas convencionales, el método de lattice-Boltzmann permite encontrar la solución de ecuaciones de mecánica de fluidos sin involucrar la resolución de sistemas de ecuaciones, usando un operador convectivo lineal, y permitiendo la representación de condiciones de contorno complejas mediante reglas mecánicas elementales.

A pesar de los significativos avances logrados en la resolución precisa y eficiente de flujos multifásicos isotérmicos, la simulación de una ecuación de energía con esquemas lattice-Boltzmann aún continúa en desarrollo. Los principales inconvenientes asociados a la búsqueda de un esquema lattice-Boltzmann han sido documentados detalladamente en trabajos como los de Li y Luo (2014); Huang y Wu (2014); Fogliatto, Teruel y Clausse (2019), vinculados a la

recuperación de una ecuación macroscópica para la temperatura con términos adicionales no deseados en las escalas de expansión relevantes. [1] [2]

Gracias a esta sencilla formulación es posible resolver problemas que resultan prohibitivos para otras metodologías, además de que la implementación computacional de modelos lattice-Boltzmann presenta un elevado nivel de escalabilidad en sistemas de procesamiento en paralelo, en particular en las unidades de procesamiento gráfico (GPUs).

Desarrollos recientes de modelos lattice-Boltzmann para la resolución de flujos multifásicos con transferencia de calor y cambio de fase demuestran que con esta metodología es posible resolver adecuadamente problemas asociados a fenómenos de ebullición y condensación con tiempos de cálculo aceptables, incluso con implementaciones sobre CPUs.

En este sentido, la resolución de los métodos antes mencionados usando procesamiento en GPUs permitiría reducir significativamente los tiempos de cálculo involucrados, logrando ampliar (con fines prácticos) la variedad de problemas que pueden ser resueltos con esta técnica.

En nuestra búsqueda como docentes investigadores tratamos de que las TIC conformen redes entre universidad y estudiantes que amplíen la transferencia mutua de conocimientos y la formación integral de ciudadanos. "En suma, la apuesta por una sociedad del conocimiento en la educación universitaria del siglo XXI procura abrir espacio y tiempo para el desarrollo de aprendizajes y saberes no sólo intelectuales sino personales, sociales y culturales que permitan al estudiante aprender a conocer y conocerse en sus dimensiones personal, colectiva y global (terrestre)" [3], en donde "a partir de la adopción de una perspectiva constructivista del aprendizaje, se

comienza a concebir al alumno como sujeto activo en la conducción del proceso de construcción del conocimiento” [4].

Para llevar a cabo esta propuesta se incorpora el uso del modelo de programación paralela Cuda con el compilador nvcc del lenguaje C, del entorno de desarrollo integrado (IDE) y multiplataforma de código abierto Spyder para lenguaje Python, la herramienta generalizada de automatización de código Cmake, del sistema de gestión de proyectos y control de versiones de código online Github, para trabar en grupo porque *“compartir procesos cognitivos, a través del razonamiento y la argumentación, promotores de la construcción y reconstrucción de conocimientos científicos en grupos (...) puede ser una respuesta a los desafíos de la práctica docente universitaria.”* [5]

2. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Esta investigación se enmarca en los proyectos PICT-201-0937 “Uso de herramientas numéricas para el estudio y diseño de dispositivos termohidráulicos utilizados en la industria nuclear”, y PID SIIP Tipo 1 Bienal 2019 “Métodos numéricos aplicados en problemas de ingeniería y de medicina nuclear”. Este último, cofinanciado entre la Universidad Nacional de Cuyo a través del Instituto Balseiro (IB), y la Comisión Nacional de Energía Atómica a través del departamento Mecánica Computacional. La investigación y desarrollo involucra a estudiantes del Instituto Balseiro y a profesionales de Centro Atómico Bariloche.

Los ejes de la presente investigación son:

- el método de lattice-Boltzmann como simplificación de la resolución de problemas de mecánica de fluidos computacional,
- la paralelización de código para cálculo científico para ser procesado por placas gráficas,
- el uso de entornos de trabajo colaborativo en proyectos universitarios de formación, y en proyectos de investigación y desarrollo. Porque “explorar experiencias con TIC en educación superior, es siempre un aporte rico y prometedor para comprender y encontrar estrategias” [6] que mejoran el desempeño estudiantil.

3. RESULTADOS OBTENIDOS/ESPERADOS

Algunas de las interrogantes que guían esta investigación son: *¿Qué grado de complejidad encierra la capacitación de estudiantes en el área de programación paralela? ¿Cuánto contribuyen los entornos y las herramientas colaborativas para el desarrollo de software de cálculo? ¿Qué nivel de escalabilidad proporciona una implementación en GPU del modelo de lattice-Boltzmann?*

Los objetivos de la presente son:

- desarrollar una herramienta numérica que permita resolver modelos de lattice-Boltzmann para flujo multifásico con transferencia de calor en geometrías sencillas empleando unidades de procesamiento gráfico,
- validar la herramienta desarrollada,
- optimizar la herramienta numérica.

Nos enfocaremos en la capacitación de un estudiante de ingeniería en el uso de herramientas para desarrollo de software colaborativas, en su

incorporación a un grupo de trabajo conformado en investigación y desarrollo en el área de mecánica computacional, y en el desarrollo de un software para cálculo numérico que basado en el modelo de lattice-Boltzmann para la resolución de flujo multifásico con transferencia de calor, permite resolver problemas relacionados con fenómenos de ebullición y condensación.

Actualmente se está validando una implementación en cuda C con resultados de una implementación previa en C, y se están haciendo las mismas implementaciones para Python empleando Pycuda.

Se optimizaron funciones elementales del modelo lattice-Boltzmann en estudio.

En etapas posteriores se continuará con la optimización del software de cálculo numérico apuntando a mejorar el almacenamiento de estructuras de datos en la memoria, la generación de una versión compatible con el sistema operativo Linux y Windows, y se intentará proponer una interfaz gráfica amigable para la aplicación de cálculo que facilite su uso al usuario final.

Producción 2018/2020:

- Fogliatto, E. O., Clause, A., & Teruel, F. E. (2019). Simulation of phase separation in a Van der Waals fluid under gravitational force with Lattice Boltzmann method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*.
- Fogliatto, E. O., Teruel, F. E., y Clause, A.. Transferencia de calor en flujo multifásico mediante el método de Lattice Boltzmann. XXIV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones. Santa Fe, 5-7 Noviembre 2019. In: *Mecánica Computacional*, vol. 37, no 22, Multiphase Flow and Transport in Porous Media and Microscale (A), p. 875-885 ISSN 2591-3522 (2019).
- Fogliatto, E. O., Teruel, F. E., y Clause, A.. Modelado y simulación de flujo multifásico mediante el método de Lattice-Boltzmann. XII Congreso Argentino de Mecánica Computacional Numéricos y sus Aplicaciones. Tucumán, 6-9 Noviembre 2018. In: *Mecánica Computacional*, vol. 36, no 23, Multiphase Flow and Transport in Porous Media and Microscale, p. 875-885 ISSN 2591-3522 (2018).

4. FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

- El Mgter. Ezequiel O. Fogliatto se encuentra realizando el doctorado en Ingeniería en el Instituto Balseiro de la Universidad Nacional de Cuyo, posee categoría V como docente investigador por la Universidad Nacional de Cuyo y ejerce la docencia en el área de Termofluidos en Instituto Balseiro.
- El Ing. Pablo E. Argañaraz realiza la maestría en Procesos Educativos Mediados por Tecnología del CEA en la Universidad Nacional de Córdoba, posee categoría IV como docente investigador por la Universidad Nacional de Río Negro en el Taller de Informática y TICs de la Sede Andina Bariloche, y es docente de Fundamentos de Informática en Ingeniería Mecánica en UTN FRBA Extensión Áulica Bariloche.
- Tomás Coronel lleva adelante su tesina de grado en el Instituto Balseiro en relación directa con las líneas de investigación presentadas.

- El equipo de trabajo realiza sus tareas de investigación y desarrollo en el departamento Mecom en Centro Atómico Bariloche.

5. BIBLIOGRAFIA

- [1]. Fogliatto, E. O., Clause, A., & Teruel, F. E. (2019). Simulation of phase separation in a Van der Waals fluid under gravitational force with Lattice Boltzmann method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*.
- [2]. Fogliatto, E. O., Teruel, F. E., y Clause, A.. Transferencia de calor en flujo multifásico mediante el método de Lattice Boltzmann. *XXIV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones*. Santa Fe, 5-7 Noviembr 2019. In: *Mecánica Computacional*, vol. 37, no 22, Multiphase Flow and Transport in Porous Media and Microscale (A), p. 875-885 ISSN 2591-3522 (2019).
- [3]. Fandiño Parra, Y.J.: La educación universitaria en el siglo XXI: de la sociedad de la información a la sociedad del conocimiento. In: *Revista Iberoamericana de Educación*, vol. 55, no 3, ISSN 1681-5653 (2011).
- [4]. Dumrauf, A.G., Colinviaux, D., Cordero, S.: ¿Y si trabajan en grupo...? Interacciones entre alumnos, procesos sociales y cognitivos en clases universitarias de Física. In: *Enseñanza de las Ciencias: revista de investigación y experiencias didácticas*, vol. 20, no 3, p. 427-442 (2002).
- [5]. Kuznik, F., Obrecht, C., Rusaouen, G., & Roux, J. J. (2010). LBM based flow simulation using GPU computing processor. *Computers & Mathematics with Applications*, 59(7), 2380-2392.
- [6]. Argañaraz, P. E., Britos, P. V., & Verdun, N. (2014). Experiencias educativas en el uso de TIC en la educación superior en la sede andina de la Universidad Nacional de Río Negro. In *XVI Workshop de Investigadores en Ciencias de la Computación*.
- [7]. Li, Q., & Luo, K. H. (2014). Thermodynamic consistency of the pseudopotential lattice Boltzmann model for simulating liquid–vapor flows. *Applied Thermal Engineering*, 72(1), 56-61.
- [8]. Huang, R., & Wu, H. (2014). A modified multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for convection–diffusion equation. *Journal of Computational Physics*, 274, 50-63.