

Aplicações de Alto Desempenho: Modelos Computacionais 2-D e 3-D para a Hidrodinâmica e o Transporte de Massa

**Rogério L. Rizzi¹, Ricardo V. Dorneles², Ana P. Canal, Peter C. Goulart,
Prof. Tiarajú A. Diverio**

Programa de Pós-Graduação em Computação, Instituto de Informática, UFRGS,
E-mail: {rizzi, cadinho, apc, peter, diverio}@inf.ufrgs.br
<http://www.inf.ufrgs.br/~hgmc/>

Introdução e Motivação

O Grupo de Matemática da Computação e Processamento de Alto Desempenho (GMC-PAD do PPGC da UFRGS) vem trabalhando em aplicações de alto desempenho, como no desenvolvimento de modelos computacionais paralelos para a simulação do escoamento e do transporte de substâncias em corpos de água. Isso inclui o desenvolvimento de esquemas numéricos e de métodos de solução para a discretização e a solução das equações governantes dos fenômenos do escoamento e do transporte de massa. Para a resolução de sistemas lineares esparsos de grande porte decorrentes da discretização, foram implementados alguns métodos iterativos. Estão sendo estudados algoritmos de particionamento do domínio e algoritmos de balanceamento dinâmico de carga. Objetiva-se o desenvolvimento de um ambiente gráfico que contemple a entrada, o processamento e a saída de dados, visando simulação e predição de escoamentos genéricos, ou seja, uma ferramenta que permita o estudo do comportamento hidrodinâmico e do transporte de poluentes.

A motivação está centrada na importância, demonstrada pela história, que as margens e zonas costeiras tem sido locais importantes para aglomerações de seres humanos. Porém, rios, estuários, mares e oceanos tem servido como coletores de esgotos domésticos e industriais que são danosos à vida desses ecossistemas se não forem adequadamente tratados. É importante, então, a disponibilização de modelos computacionais com alta resolução para a hidrodinâmica e o transporte de massa em rios. Uma aplicação específica para os modelos desenvolvidos é o Rio Guaíba. Ele banha toda a região metropolitana de Porto Alegre e é importante para o abastecimento de água para as cidades da região, no transporte fluvial e para a irrigação, porém sofre constante despejo de poluentes industriais e domésticos. Assim o desenvolvimento e implementação de um modelo computacional com alta resolução pode simular em detalhes o comportamento hidrodinâmico e o de transporte de massa que ocorre no estuário, visando a definição de ações como a escolha de pontos de lançamento dos esgotos e o impacto no meio ambiente e, no planejamento e avaliação do impacto de obras de aproveitamento hídrico, entre outras. Contudo, para obter informações detalhadas e realísticas, uma grande quantidade de memória e poder de processamento são necessários, respectivamente, para armazenar as estruturas de dados e para resolver

¹ Professor da UNIOESTE – Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Cascavel.

² Professor da UCS - Universidade de Caxias do Sul, Caxias do Sul.

os sistemas a cada passo de tempo. Dessa forma, o processamento de alto desempenho é uma alternativa indispensável para atender a esses requisitos.

Modelos Computacionais e Ambiente de Desenvolvimento

A partir das equações discretizadas, foram desenvolvidos três modelos computacionais bidimensionais (2-D) para a hidrodinâmica e para o transporte de massa. Modelos tridimensionais (3-D) em fase de desenvolvimento.

Um, baseado na estratégia da decomposição do domínio Krylov-Schwarz; outro, baseado na abordagem da decomposição dos dados e, o terceiro, baseado em uma abordagem híbrida. Considera a decomposição do domínio em uma das direções coordenadas e decomposição dos dados na outra direção coordenada. Esses modelos são resolvidos, respectivamente, usando os algoritmos do gradiente conjugado preconditionado definido localmente; o algoritmo do gradiente conjugado preconditionado definido globalmente; e o método ADI associado com o algoritmo de Thomas pipeline.

Quanto aos modelos computacionais para o transporte de massa foram dois os desenvolvidos e implementados. Um deles baseado na decomposição do domínio Krylov-Schwarz e o outro baseado na abordagem híbrida. Eles foram resolvidos de forma análoga aos da hidrodinâmica, exceto que em vez de se aplicar o algoritmo do gradiente conjugado, utilizou-se o algoritmo do GMRES, já que as matrizes não são simétricas e definida-positiva.

Todos os modelos implementados consideram os dados iniciais e de contorno para o domínio de definição, pois a partir desses dados as EDPs são resolvidas em cada nodo da malha computacional. A decisão de implementar três modelos computacionais, deve-se ao fato de averiguar quais das associações: esquema numérico + estratégia de paralelização + método de solução é mais conveniente, tanto do ponto de vista computacional quanto do ponto de vista da qualidade da simulação oferecida pelo modelo.

Os modelos computacionais foram implementados em linguagem C, usando-se a biblioteca de passagem de mensagens MPI. Eles foram executados em um cluster de PCs com 4 nodos conectados por redes Fast Ethernet e Myrinet. Cada nodo possui 2 processadores Pentium Pro 200 e 128 Mbytes de memória. O sistema operacional é o Linux 2.2.1 com compilador gcc 2.91.60.

Alto Desempenho e Eficiência Computacional

As estratégias e os métodos de paralelização de algoritmos devem considerar pelo menos quatro questões fundamentais, que são: a localidade dos dados, a eficiência dos métodos de solução, o particionamento do domínio e o balanceamento de carga. Essas quatro questões são abordadas no contexto dessa aplicação. A primeira questão é tratada com os métodos de decomposição do domínio que dividem o problema em subproblemas que podem ser resolvidos localmente. A segunda questão é centrada no

uso dos métodos de decomposição do domínio para melhorar a taxa de convergência dos métodos de solução numérica. As outras questões tratam de como particionar a região computacional de tal forma a maximizar a computação e minimizar a comunicação, considerando a dependência de dados, a carga e o mapeamento das tarefas aos processadores através do uso de mecanismos de balanceamento dinâmico de carga que consideram os paralelismos entre processadores do mesmo nodo e entre nodos.

Considerações Finais

Inicialmente o trabalho se centrou no desenvolvimento de esquemas numéricos, métodos de solução e implementações computacionais para modelos bidimensionais. Os trabalhos atuais centram-se no desenvolvimento de esquemas numéricos mais apropriados para os modelos de transporte de massa e da hidrodinâmica 3-D. Eles devem ser conservativos, estáveis e acurados. Além disso, algoritmos de particionamento de domínio estão sendo pesquisados e incorporados aos modelos desenvolvidos.

Referências

1. Ana Paula Canal; Paralelização de Métodos de Resolução de Sistemas Lineares Esparsos com o DECK em um Cluster de PCs; Dissertação de Mestrado, PPGC/UFRGS, Porto Alegre, 2000.
2. Ricardo Vargas Dorneles, et al.: PC Cluster Implementation of a Mass Transport Two-Dimensional Model, SBAC-PAD2000. São Pedro, SP.
3. Ricardo Vargas Dorneles, et al.; Parallel Solution For Shallow Water Equations Using Data Decomposition ; IV WSDP, JCC, 2000, Santiago, Chile.
4. Rogerio Luis Rizzi, et al.; Fluvial Flow of The Guaíba River - A Parallel Solution for The Shallow Water Equations Model; VECPAR2000, Porto, Portugal.