

Processamento de alto desempenho aplicados a modelos computacionais de dinâmica de fluidos ambiental

Guilherme Galante; Jeysonn I. Balbinot;

Rogério L. Rizzi^{1,3}; Ricardo V. Dorneles^{2,3}; Tiarajú A. Diverio³

¹CCET, UNIOESTE, Campus de Cascavel / ²Dpto. de Informática, UCS / ³PPGC, UFRGS
rizzi@inf.ufrgs.br; rogerio@unioeste.br

Introdução

Nos últimos anos, tem-se trabalhado em aplicações de alto desempenho, tais como o desenvolvimento de modelos computacionais paralelos 2D e 3D para a simulação do escoamento e do transporte de substâncias em corpos de água como, por exemplo, o do Lago Guaíba. Essa modelagem envolve etapas como o desenvolvimento e construção de esquemas numéricos; de algoritmos de particionamento da malha numérica; de estratégias e técnicas de decomposição de dados e decomposição de domínio; de algoritmos para a resolução dos sistemas de equações; de algoritmos para balanceamento de carga e de implementação computacional em clusters de PCs.

O presente trabalho está centrado nas questões da obtenção de solução paralela empregando as abordagens de decomposição de dados e de domínio. E dentro desse contexto, em 2001, iniciou-se o desenvolvimento de um projeto conjunto entre o PPGC da UFRGS, o CCET da UNIOESTE e o Departamento de Informática da UCS, com a finalidade de desenvolver algumas das fases desses modelos computacionais, no âmbito do Programa Plano Sul (CNPq/FAPERGS).

Essas fases abrangem a definição dos modelos matemáticos que descrevem a hidrodinâmica e o transporte de substâncias em corpos de água; a análise e definição das técnicas de aproximação/interpolação e da malha numérica que serão empregadas para construir os esquemas numéricos; a construção dos esquemas numéricos para obter os sistemas de equações que deverão ser resolvidos empregando métodos diretos e/ou iterativos de solução; o desenvolvimento de algoritmos de particionamento da malha numérica, bem como as estratégias e algoritmos para a decomposição de dados e a decomposição de domínio [CHA94] e [DEB98], visando a obtenção do paralelismo.

Mais especificamente, esse trabalho apresenta o andamento dessa pesquisa quanto ao levantamento e documentação de bibliotecas de solução de sistemas de equações; e ao estudo de algoritmos baseados nas técnicas de decomposição de dados visando paralelizar métodos do subespaço de Krylov que são empregados na resolução dos sistemas de equações.

Modelos Computacionais Paralelos

Através de modelagem computacional é possível realizar simulações que seriam inviáveis ou anti-econômicas se efetivadas através de métodos experimentais. Problemas tratados por modelagem computacional geralmente resultam em conjuntos de equações diferenciais parciais (EDPs), de condições iniciais e de condições de contorno. Essas EDPs, quando discretizadas, geram sistemas de equações de grande porte, cuja solução numérica - com alta resolução e qualidade numérica - exige grande capacidade de processamento, o que torna imprescindível empregar ambientes computacionais de alto desempenho em tais aplicações.

Neste sentido, os clusters de PCs têm se mostrado uma opção acessível e eficiente, dado o crescente desenvolvimento da tecnologia de redes de alta velocidade que permite obter, nesses ambientes, desempenho equivalente a processadores vetoriais por um custo muito menor.

Portanto, é possível o desenvolvimento e a implementação de modelos computacionais com alta resolução e com qualidade numérica aplicáveis à simulação de processos, envolvendo dinâmica dos fluidos computacional, particularmente a circulação atmosférica e a fluvial. Esses modelos necessitam, como já destacado, de grande quantidade de memória e alto desempenho para que o processamento seja realizado em um tempo tal que seus resultados sejam úteis para finalidades práticas.

Ambiente Computacional

Inicialmente os algoritmos serão desenvolvidos, implementados e testados (verificação, validação, certificação) em uma máquina Pentium Dual 866 MHz, sob o sistema operacional Linux no Laboratório de Sistemas Distribuídos e Paralelos da UNIOESTE. Posteriormente serão feitos testes no cluster de PCs multiprocessados da UFRGS, com acesso via *ssh*, para fins da experimentação numérica e para a análise da escalabilidade, eficiência e *speedup* desses algoritmos.

O cluster da UFRGS é formado por 11 nodos multiprocessados, interligados por duas redes de comunicação, sendo elas *Fast-Ethernet* e *Myrinet*. Os nodos apresentam a configuração representada na tabela 1.

Tabela 1 - Configuração dos nodos do cluster da UFRGS

Máquina	CPU	RAM	Rede
Scliar	Pentium II 266 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i>
Veríssimo	Dual Pentium Pro 200 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i> e <i>Myrinet</i>
Quintana	Dual Pentium Pro 200 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i> e <i>Myrinet</i>
Dionelio	Dual Pentium Pro 200 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i> e <i>Myrinet</i>
Euclides	Dual Pentium Pro 200 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i> e <i>Myrinet</i>
Ostermann	Pentium Pro 200 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i> e <i>Myrinet</i>
Luft	Pentium Pro 200 MHz	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i> e <i>Myrinet</i>
Michelle	Dual Pentium III 500 MHz(SCI)	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i>
Demi	Dual Pentium III 500 MHz(SCI)	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i>
Sharon	Dual Pentium III 500 MHz(SCI)	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i>
Kim	Dual Pentium III 500 MHz(SCI)	512 MB	<i>Fast-Ethernet</i>

Em sistemas de memória distribuída, como o cluster que será usado neste projeto, os processos se comunicam por troca de mensagens. Para isso, há diversos padrões e especificações para primitivas de inicialização e sincronização de processos no ambiente distribuído, bem como a envio de mensagens entre eles. O padrão escolhido é o MPI (*Message Passing Interface*), dada sua portabilidade e robustez.

Métodos de Resolução de Sistemas de Equações

Os sistemas de equações decorrentes da discretização são esparsos e de grande porte. Considerando essas características, os métodos de resolução mais apropriados são aqueles iterativos. E nessa classe os iterativos os mais eficientes são os do subespaço de Krylov [SAA96].

Assim, para aumentar a eficiência do esquema numérico-computacional, serão implementados alguns algoritmos dessa classe de métodos iterativos. Pode-se citar o Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES) [GOO96] e o Gradiente Conjugado (GC) [SHE94], pois serão empregados para obter a solução dos sistemas de equações. Neste caso, o paralelismo será obtido através do paradigma da divisão e conquista que, para problemas como o abordado no projeto, consiste em:

- decomposição de dados, onde se distribui as operações e os dados entre os processadores de modo que possam ser resolvidos independentemente, exceto nos pontos de sincronismo. Nessa abordagem, gera-se um único sistema de equações para todo o domínio computacional que é resolvido de forma distribuída, empregando um método de solução paralelizado;
- decomposição de domínio, onde o domínio original é decomposto em subproblemas. Nesse projeto se empregará o método aditivo de Schwarz com sobreposição, onde os subdomínios usam a solução da última iteração como condição de contorno, de forma que cada um dos subdomínios pode ser resolvido independentemente, ficando as comunicações restritas às fronteiras onde ocorrem trocas de dados. A presença de regiões sobrepostas assegura a continuidade da solução e de suas derivadas, entre os diferentes subdomínios [DEB98].

```

I ← 0
r ← b - Ax          (subtração de vetores (produto matriz vetor))
d ← r
δ_novo ← rTr        (produto escalar)
δ_o ← δ_novo
enquanto I < I_max e δ_novo > ε2δ_o faça
    q ← Ad           (produto matriz vetor)
    α ← δ_novo / dTq  (divisão (produto escalar))
    x ← x + αd        (adição de vetores (multiplicação escalar vetor))
    se I é divisível por 50
        r ← b - Ax    (subtração de vetores (produto matriz vetor))
    else
        r ← r - αq     (subtração de vetores (multiplicação escalar vetor))
    δ_velho ← δ_novo
    δ_new ← rTr        (produto escalar)
    β ← δ_velho / δ_novo
    d ← r + βd         (adição de vetores (multiplicação escalar vetor))
    I ← I + 1

```

Figura 1: Algoritmo do Gradiente Conjugado [SHE94]

Estado Atual da Pesquisa

Espera-se obter algoritmos eficientes e escaláveis para a resolução de sistemas de equações, em cluster de PCs multiprocessados, através do emprego do paradigma de programação SPMD, utilizando as bibliotecas MPI e Pthreads [PAC97], [LEW98]. Tais algoritmos devem ser utilizados nos modelos computacionais paralelos para a circulação e o transporte de substâncias do Lago Guaíba que estão sendo desenvolvidos como parte integrante do projeto Plano Sul.

Após concluída a implementação paralela do Gradiente Conjugado, que pode ser visto na figura 1, ela foi testada no cluster da UFRGS, especificamente em quatro nodos Dual Pentium Pro 200 MHz, interligados por rede Fast-Ethernet. Os resultados relativos ao *speedup* e a eficiência estão expressos, respectivamente, nas tabelas 2 e 3.

Pode-se observar que foram obtidos ganhos de desempenho em relação à implementação com um só processador. Porém a eficiência cai sensivelmente, em alguns casos, quando se aumenta a quantidade de processos, devido ao acréscimo de tempo de comunicação entre nodos.

Tabela 2

Matriz	Número de Processos			
	1	2	4	8
400x400	1	1.9136	3.4206	4.7402
500x500	1	1.9440	3.6462	4.6754
600x600	1	1.9603	3.9345	5.2309
700x700	1	1.8226	3.7112	5.4502
800x800	1	1.9842	3.7981	4.6252
900x900	1	1.9947	3.8508	5.3152
1000x1000	1	1.9523	3.8179	5.0399

Tabela 3

Matriz	Número de Processos			
	1	2	4	8
400x400	1	0.9568	0.8552	0.5925
500x500	1	0.9720	0.9116	0.5844
600x600	1	0.9801	0.9836	0.6538
700x700	1	0.9113	0.9278	0.6814
800x800	1	0.9921	0.9495	0.5782
900x900	1	0.9978	0.9627	0.6644
1000x1000	1	0.9762	0.9545	0.6299

Comentários Finais

O desenvolvimento de aplicações paralelas é hoje o caminho natural em áreas que requerem grande capacidade de processamento. A disseminação do uso de *clusters* de PCs, consequência direta do baixo custo do *hardware* e do desenvolvimento de redes de alta velocidade, permite que muitos problemas complexos anteriormente tratados exclusivamente em supercomputadores, sejam resolvidos em plataformas de baixo custo.

O domínio da tecnologia envolvida no desenvolvimento deste trabalho permitirá a abordagem de outras aplicações em Dinâmica de Fluidos Computacional, como, por exemplo, previsão atmosférica e qualidade do ar. Além disso, pode-se efetuar a transferência da tecnologia envolvida a instituições de ensino e de pesquisa.

Referências

- [CHA94] CHAN, T. F.; MATHEW, T. P. **Domain Decomposition Algorithms**. Acta Numerica, p.61-143. 1994;
- [DEB98] DEBREU, L., BLAYO, E. **On the Schwarz Alternating Method for Oceanic Models on Parallel computers**. Journal of computational Physics, V. 141, p. 93-111. 1998;
- [GOO96] GOOSSENS, S. TAN, KIAN, ROOSE, D. **An Efficient FGMRES Solver for the Shallow water Equations based on Domain Decomposition**. 9th International Conference on Domain Decomposition Methods in Scientific and Engineering Computing, 1996. Disponível em <http://www.ddm.org>. 1999;
- [LEW98] LEWIS, Bil BERG, Daniel J. **Multithreaded Programing with Pthreads**. Sun Microsystems Press, Mountain View, 1998.
- [PAC97] PACHECO, P. S. **Parallel Programming with MPI**. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, Inc. 1997. 419p.
- [SAA96] SAAD, Y. **Iterative Method for Sparse Linear Systems**. Boston. PWS Publishing Company. 1996.
- [SHE94] SHEWCHUK, J. R. **An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain**. 1994. disponível em <http://www.cs.cmu.edu/~jrs/jrspapers>.