

433393

Aplicações dos Computadores (SC)
Simulação
Processamento: Alto desempenho
Mecânica: Fluidos

Um modelo paralelo de hidrodinâmica e transporte de substâncias

CNPq 1.03.04.00-2

Ricardo Vargas Dorneles¹

Rogério Luis Rizzi²

Philippe Olivier Alexandre Navaux³

Tiarajú Asmuz Diverio⁴

Resumo

Este artigo apresenta de forma resumida o modelo paralelo de circulação e transporte de substâncias que vem sendo desenvolvido no GMCPAD-GPPD nos últimos 4 anos. O desenvolvimento de um modelo paralelo de simulação de fenômenos físicos envolve diversos tópicos como a seleção das equações físicas que irão modelar o fenômeno, os métodos de discretização que serão utilizados e os algoritmos de resolução dos sistemas de equações gerados, bem como tópicos específicos de aplicações paralelas, como a abordagem de paralelização utilizada, estruturas de dados, comunicação e balanceamento de carga, sendo impossível apresentar o modelo completo no espaço disponível para esse resumo. Dessa forma, será apresentada uma visão bem superficial do mesmo e serão fornecidas referências para os trabalhos nos quais o modelo é apresentado em detalhes.

1 Introdução

Na modelagem de fenômenos físicos envolvidos em mecânica de fluidos, os mesmos são descritos através de sistemas de equações diferenciais parciais (EDPs) acopladas que geralmente não possuem solução analítica. Assim, a solução numérica é a alternativa mais adequada de resolver os problemas. Para isso, o domínio contínuo é discretizado, gerando uma grade ou malha de pontos, e as equações contínuas também são discretizadas gerando sistemas de equações que são resolvidos nessas malhas. Além da discretização espacial, o tempo também é discretizado sendo para isso dividido em passos e, para cada passo de tempo, as equações são resolvidas.

¹cadinho@inf.ufrgs.br

²rizzi@inf.ufrgs.br

³navaux@inf.ufrgs.br

⁴Apoio: CNPq e LabTeC UFRGS/Dell

O modelo desenvolvido neste trabalho é baseado nas Equações de Shallow Water (RIZZI, 2002), que podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} &= -g \frac{\partial \eta}{\partial x} + v_h \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \Phi v \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} &= -g \frac{\partial \eta}{\partial y} + v_h \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \Phi u \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0 \end{aligned}$$

onde

- $u = u(x, y, z, t)$ e $v = v(x, y, z, t)$ são as velocidades horizontais nas direções X e Y , e $w = w(x, y, z, t)$ é a velocidade vertical na direção Z ;
- $\eta = \eta(x, y, t)$ é a altura da água acima de um nível de referência;
- $\Phi = 2\omega \sin\phi$ é a força de Coriolis, onde ω é a velocidade angular da Terra e ϕ é a latitude;
- $v_h = v_h(x, y, z, t)$ é o coeficiente de viscosidade cinemática turbulenta horizontal;
- $v_v = v_v(x, y, z, t)$ é o coeficiente de viscosidade cinemática turbulenta vertical;
- g é a aceleração gravitacional, e t é o tempo.

A equação para a integração entre as camadas é obtida integrando a equação da continuidade sobre a coluna de água e usando a condição de contorno cinemática na superfície livre e é dada por

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_{-h}^{\eta} u dz \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\int_{-h}^{\eta} v dz \right) = 0$$

onde $h = h(x, y)$ é a profundidade da água medida a partir de um dado nível.

Sendo um problema de valor inicial e de contorno, é necessário especificar essas condições. Nos contornos fechados a condição imposta foi que velocidades e níveis de água são ambos nulos. Nas fronteiras abertas foram especificados dois tipos de condições de contorno. O tipo nível e o tipo fluxo (velocidade ou vazão).

A equação de transporte escalar de substâncias 3D (ETM3D) é o modelo matemático para o transporte (advecção e difusão) de substâncias dispersas em água. É uma EDP hiperbólica não linear e é escrita como:

$$\frac{\partial(S)}{\partial t} + \frac{\partial(uS)}{\partial x} + \frac{\partial(vS)}{\partial y} + \frac{\partial(wS)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\epsilon_h \frac{\partial S}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\epsilon_h \frac{\partial S}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\epsilon_v \frac{\partial S}{\partial z}) + FS + K$$

onde S é a concentração; $\epsilon_h = \epsilon_h(x, y, z, t)$ é o coeficiente de difusão turbulenta horizontal; $\epsilon_v = \epsilon_v(x, y, z, t)$ é o coeficiente de difusão turbulenta vertical; F é o termo de fonte e $K = 2,3/T_{90}$, em que T_{90} é o tempo para remover 90 % dos organismos, é a matriz de decaimento. Esses coeficientes, bem como os das equações da hidrodinâmica, são fornecidos por um modelo de parametrização de turbulência.

A solução da ETM também requer a especificação de CC (condições de contorno) dos tipos de Dirichlet e de Neumann. A CC de Dirichlet é definida especificando uma concentração nas fronteiras *inflow* para um período específico de tempo, de modo a agir como uma fonte, fornecendo massa para o domínio, ou como sumidouro, retirando a massa do domínio. Neste caso, a CC é dada por $S = S(x, y, z, t)$, em que $(x, y, z, t) \in \partial\Omega_x[0, T]$, onde $\partial\Omega$ denota a fronteira do domínio e $S = S(x, y, z, t)$ é uma concentração nessa fronteira. A CC tipo Neumann ocorre quando o gradiente de concentração é normal à fronteira, de modo que um fluxo dispersivo é aí especificado. Essa CC é expressa como $\frac{\partial S}{\partial n}$, em que $n = n(x, y, z, t)$ é o vetor unitário normal no ponto $(x, y, z, t) \in \partial\Omega$. Neste trabalho tomou-se o gradiente nulo, $\nabla S_{\partial\Omega} = 0$, na fronteira *outflow*, indicando que a taxa de variação espacial é nula, de modo que as substâncias possam sair do domínio sem acumular-se nessa fronteira.

2 Discretização: esquema numérico semi-implícito

As equações que descrevem os fenômenos físicos são contínuas e não tem solução analítica. Para a solução das mesmas é necessário que sejam discretizadas, bem como o domínio do problema. Nesse processo de discretização, os termos das equações são aproximados e os sistemas de equações resultantes desse processo de discretização são resolvidos utilizando métodos numéricos. Existem diversas classes de métodos para fazer estas aproximações, entre os quais o método de diferenças finitas, o método dos elementos finitos e o método de volumes finitos. Neste trabalho foram utilizadas diferenças finitas por ser um método suficientemente adequado para os propósitos deste trabalho, além de possuir características que permitem uma boa exploração do paralelismo das máquinas multiprocessadas (RIZZI, 2002).

Neste trabalho foram construídos esquemas semi-implícitos que resultam em matrizes simétricas definidas positivas (SDP), de tal forma que é possível empregar o método do gradiente conjugado. Para o transporte de substâncias foi utilizada uma abordagem implícita na vertical e explícita na horizontal, na qual foi gerado um sistema de equações para cada coluna de água, sendo esse sistema tri-diagonal e resolvível pelo método de Thomas.

A forma de paralelização mais utilizada em modelos hidrodinâmicos é a divisão do domínio entre os diversos processadores. A partir dessa distribuição, algumas abordagens são possíveis. Na decomposição de domínio, cada processador monta, a partir de seu subdomínio, um sistema de equações e os diversos sistemas são resolvidos pelos processadores onde foram gerados, trocam-se dados nas fronteiras dos subdomínios e o processo se repete até que as soluções dos sistemas locais convergem para a solução global. Na abordagem por particionamento de dados, é montado um único sistema para todo o domínio, cada processador montando uma parte do sistema, e o mesmo é resolvido em paralelo pelos diversos processadores. Qualquer que seja o método utilizado, para manter a consistência e a continuidade na fronteira entre os subdomínios, os processadores precisam trocar dados entre si a cada passo de tempo, o que insere pontos de sincronização entre os mesmos. No modelo desenvolvido nesse trabalho foi utilizada a abordagem de Decomposição de Domínio, mas há trabalhos em andamento no grupo envolvendo a paralelização dos métodos numéricos e o uso de abordagens híbridas para a paralelização do modelo.

3 Particionamento e Balanceamento Dinâmico

Para o particionamento do domínio nesse trabalho foram implementados diversos algoritmos de particionamento, entre os quais algumas variantes de particionadores por faixas e bissecção coordenada recursiva, além de terem sido feitos experimentos com duas bibliotecas de particionamento, o MÉTIS e o CHACO.

Como foi apresentado na seção anterior, o modelo desenvolvido utiliza duas malhas de refinamentos diferentes, uma das quais sobre a qual ocorre a hidrodinâmica e a outra, de refinamento maior e que é alterada durante a simulação, sobre a qual ocorre o transporte de substâncias. Para calcular o transporte de substâncias na malha refinada, são necessárias informações sobre o campo de velocidades calculado na malha não refinada, o que causa uma dependência entre as duas malhas. Essa dependência, aliada ao fato de a malha refinada ser alterada durante a simulação, faz com que o particionamento das duas malhas de forma a manter a carga bem distribuída entre os processadores durante todo o período da simulação seja um problema bastante complexo, tendo sido tema de uma tese de doutorado no grupo (DORNELES, 2003).

Para resolver esse problema, duas soluções de balanceamento dinâmico foram implementadas. Na primeira, as duas malhas são particionadas independentemente e os dados necessários para a malha refinada são buscados, a cada ciclo, do processo que os detém; na segunda, inicialmente a malha refinada e a parte da malha da hidrodinâmica associada a ela são particionadas com um particionamento por faixas e na segunda etapa é particionada a parte da malha da hidrodinâmica onde não ocorre transporte. O bom desempenho de um esquema de balanceamento como o descrito depende de diversos parâmetros como a frequência com que a distribuição de carga é analisada pelos processos, o percentual da diferença de carga a

ser transferido e a diferença de carga a partir da qual é disparado o processo de redistribuição. Como parte do trabalho de desenvolvimento desses mecanismos, foi avaliado o efeito de diversos desses parâmetros.

Ambas abordagens apresentaram ganhos de desempenho satisfatórios, sendo que em alguns casos a abordagem do particionamento independente das malhas apresentou melhor resultado e em alguns casos o particionamento acoplado das malhas apresentou melhor resultado.

4 Métodos numéricos de resolução de sistemas de equações utilizados

Para a resolução dos sistemas de equações gerados pelo modelo desenvolvido neste trabalho e em (RIZZI, 2002) foram pesquisados e implementadas versões seqüenciais e paralelas de diversos métodos de solução. A necessidade de implementar diversos métodos vem do fato que alguns métodos são mais apropriados para alguns tipos de sistemas de equações. Existem diversas bibliotecas com rotinas para resolução de sistemas de equações, mas no início do desenvolvimento do modelo não se tinha conhecimento de bibliotecas que explorassem o paralelismo intranodos através do uso de *threads*, razão pela qual se decidiu pela programação dos métodos dentro dos modelos ao invés da utilização de bibliotecas. A partir da decisão de implementar os resolvidores, diversos trabalhos foram desenvolvidos pelo grupo sobre paralelização de resolvidores utilizando troca de mensagens e *threads*. Alguns dos trabalhos são (DORNELES, 2000), (PICININ, 2001) e (MARTINOTTO, 2002).

Os resolvidores implementados pelo grupo e utilizados em alguma versão do modelo foram: o Gradiente Conjugado, apropriado para matrizes simétricas definidas positivas (SDP), para os quais foram implementadas versões paralelas e seqüenciais; o algoritmo do GMRES, apropriado para matrizes não simétricas; o algoritmo de Thomas, uma particularização da eliminação de Gauss para matrizes tridiagonais, sendo o único, dentre os métodos implementados, que é classificado como método direto, enquanto os outros são métodos iterativos.

5 Descrição do ambiente utilizado

Os modelos computacionais foram implementados em linguagem C, utilizando o compilador gcc 2.91.60 sobre o sistema operacional LINUX 2.2.1. Como biblioteca de troca de mensagens foi utilizado o MPICH versão 1.2.1, uma implementação do padrão MPI 1.0 desenvolvida no Argonne National Laboratory. Diversos *clusters* foram utilizados nas diferentes fases desse trabalho. A fase final do desenvolvimento e avaliação dos modelos deu-se no *cluster labtec*.

O *cluster* labtec possui 20 nodos biprocessados ligados entre si por dois *switches* com 24 portas Fast Ethernet (100 Mbps) cada um e uma porta Gigabit Ethernet (1000 Mbps), utilizada para fazer a comunicação dos nodos com o servidor. Cada nodo do *cluster* é composto por uma placa Dual Pentium III 1.1 Ghz, com 1 Gb de memória RAM, um disco rígido SCSI de 18 Gb e uma placa de rede Gigabit Ethernet. O servidor de acesso ao *cluster* é um Dual Pentium IV Xeon 1.8 Ghz com 1 Gb de memória RAM, um disco rígido SCSI de 36 Gb e uma placa de rede Gigabit Ethernet.

6 Conclusões

O desenvolvimento de uma aplicação como a descrita neste trabalho é um trabalho multidisciplinar, envolvendo em partes iguais aspectos matemáticos e computacionais. Para o desenvolvimento e depuração desse modelo foram necessários alguns milhares de horas de desenvolvimento de esquemas de discretização, programação e depuração. Inicialmente foi desenvolvido um modelo seqüencial e, progressivamente, foram sendo incorporadas novas estruturas de dados e métodos de paralelização que permitiram o particionamento do domínio em subdomínios irregulares que fizeram com que o modelo desenvolvido seja versátil e possa ser aplicado a qualquer corpo hídrico. Para que o modelo fique completamente operacional, entretanto, e possa ser utilizado em aplicações reais, ainda há alguns aperfeiçoamentos que devem ser introduzidos no modelo, como um esquema de parametrização de turbulência e um novo sistema de coordenadas verticais.

Referências

- DORNELES, R. V. *Particionamento de Domínio e Balanceamento de Carga no Modelo HIDRA*. Porto Alegre, 2003. Tese de Doutorado.
- DORNELES, R. V. et al. A pc cluster implementation of a mass transport two dimensional model. In: *Proceedings do XII SBAC_PAD - Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing*. São Pedro, SP: [s.n.], 2000. p. 17–24.
- MARTINOTTO, A. L. *Paralelização de Métodos Numéricos de Resolução de Sistemas Esparsos de Equações Utilizando MPI e Pthreads*. Caxias do Sul, RS: [s.n.], 2002. Trabalho de Diplomação.
- PICININ, D. J. *Paralelização do Algoritmo do Gradiente Conjugado Através da Biblioteca MPI e de Threads*. Porto Alegre: [s.n.], 2001. Trabalho Individual.
- RIZZI, R. L. *Modelo Computacional Paralelo para a Hidrodinâmica e para o Transporte de Massa Bidimensional e Tridimensional*. Porto Alegre, 2002. Tese de Doutorado.