

UN ALGORITMO PARALELO PARA EL MÉTODO DE LAS ORDENADAS DISCRETAS EN COORDENADAS CILÍNDRICAS

Guillén, P., Sánchez, A., Torres, C.

Grupo de Ciencias Térmicas Computacionales (CTC)
Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Los Andes
Mérida 5101, Venezuela

RESUMEN

En este trabajo, un modelo numérico para resolver la Ecuación de Intercambio Radiante, EIR, en coordenadas cilíndricas por medio del Método de las Ordenadas Discretas ha sido paralelizado usando la librería de pases de mensajes, Message Passing Interface, MPI, y el resultado ha sido implementado en una IBM SP2 con 8 procesadores. La estrategia de paralelización está basada en el conjunto de cuadratura, es decir, el número de direcciones a ser resueltas y está diseñado para minimizar la interdependencia entre las direcciones encontradas en los modelos seriales en coordenadas cilíndricas. Algunas pruebas involucrando Transferencia de Radiación en medio participante son ejecutadas usando el código serial del modelo así como también combinaciones de conjuntos de cuadraturas y números de procesadores para la implementación paralela. El código serial, es también, paralelizado e implementado con las librerías LINDA en la IBM SP2 y POWER FORTRAN ACCELERATOR, PFA, en una Origin 2000 con 4 procesadores.

ABSTRACT

In this paper, a numerical model for solving the Radiative Transfer Equation, RTE, in cylindrical coordinates by means of the Discrete Ordinates Method has been parallelized using the Message Passing Interface, MPI. The resulting algorithm has been implemented on an IBM SP2 with 8 nodes. The parallelization strategy is based on the quadrature set, i.e. the number of directions to be solved and it is designed to minimize the interdependence between directions found in cylindrical coordinate models. Some tests involving radiation transfer in participating media are implemented using the serial code of the model as well as combinations of quadrature sets and number of processors for the parallel implementation. The serial code is also parallelized and implemented with the libraries: LINDA on an IBM SP2 and POWER FORTRAN ACCELERATOR, PFA, on an Origin 2000 with 4 nodes.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo actual de computadores paralelos ha creado una nueva área de cómputo científico y se ha convertido en una alternativa que permite el desarrollo de algoritmos más eficientes los cuales ofrecen la posibilidad de realizar simulaciones más precisas de problemas físicos complejos. Científicos e Ingenieros están continuamente tratando de hacer programas que sean ejecutados en el menor tiempo posible. Una manera de hacer ésto es dividir el trabajo que el programa debe hacer en partes a ser ejecutados al mismo tiempo en diferentes procesadores. En este estudio, la EIR es resuelta para un cilindro de radio finito y altura finita. El medio rodeado por el cilindro es gris y éste absorbe, emite y dispersa energía radiante. Existen tres posibilidades claras para paralelizar el Método de las Ordenadas Discretas, correspondiendo a las variables independientes que aparecen en la Ecuación de Intercambio Radiante: descomposición por longitud de onda, ángulo y espacio, [1]. En este trabajo el algoritmo serial, [2], es paralelizado usando un modelo de programación de pases de mensajes y es implementado usando la librería MPI como la interfaz [3, 4]. La estrategia de paralelización está basada en el conjunto de cuadratura, es decir, el número de direcciones a ser resueltas y está diseñado para minimizar la interdependencia entre las direcciones encontradas en los modelos seriales en coordenadas cilíndricas. Adicionalmente, el programa serial es compilado y ejecutado con las librerías LINDA y POWER FORTRAN ACCELERATOR. Los modelos que hacen uso de MPI y LINDA son ejecutados en una IBM SP2 de 8 procesadores con memoria distribuida y el modelo con POWER FORTRAN ACCELERATOR es ejecutado en una SGI Origin 2000 de cuatro procesadores con memoria distribuida compartida. El conjunto de herramientas computacionales (Hardware & Software) pertenecen al Centro Nacional de Cálculo Científico de la Universidad de Los Andes, CeCalCULA. A continuación se presenta breve descripción de la formulación y solución del problema seguida por los resultados numéricos a los ejemplos seleccionados.

EL MÉTODO DE LAS ORDENADAS DISCRETAS EN COORDENADAS CILÍNDRICAS

El método de las Ordenadas Discretas permite la solución numérica de la ecuación de intercambio radiante (EIR) para un número de direcciones discretas. Esta ecuación en un medio que dispersa, emite y absorbe en cualquier dirección puede ser escrita [5]:

$$\frac{\partial I_{\lambda}(s, \bar{\Omega})}{\partial s} + (k(s) + \sigma(s))I_{\lambda}(s, \bar{\Omega}) = k(s)I_{\lambda b}(T(s)) + \frac{\sigma(s)}{4\pi} \int_{\Omega=4\pi} I_{\lambda}(s, \bar{\Omega}') \Phi(\bar{\Omega}', \bar{\Omega}) d\Omega' \quad (1)$$

el subíndice λ indica la dependencia de la intensidad radiante con la longitud de onda.

$\frac{\partial I_{\lambda}(s, \bar{\Omega})}{\partial s}$ es la variación de la intensidad monocromática, $k(s)I_{\lambda b}(T(s))$ energía emitida por el medio debido a su temperatura, $k(s)$ es el coeficiente de absorción e $I_{\lambda b}(T(s))$ es la función de Planck, $\frac{\sigma(s)}{4\pi} \int_{\Omega=4\pi} I_{\lambda}(s, \bar{\Omega}') \Phi(\bar{\Omega}', \bar{\Omega}) d\Omega'$ es el aumento de la intensidad debido a la dispersión de la energía radiante que ingresa en la dirección de interés $\bar{\Omega}$, $\sigma(s)$ es el coeficiente de dispersión,

$\Phi(\vec{\Omega}, \vec{\Omega})$ la función de fase de la dispersión y $(k(s) + \sigma(s))I_\lambda(s, \vec{\Omega})$ atenuación de la intensidad a través de ds debido a la absorción y a las características de dispersión hacia afuera del medio.

La discretización de la Ecuación (1), la selección de una cuadratura apropiada y el modelaje de la función fase para problemas bi-dimensionales en geometrías axisimétricas está ampliamente descrito en la literatura, [6, 7, 8].

La EIR es resuelta para un conjunto de $N(N+2)/8$ direcciones, para $N = 2, 4, 6, \dots$ donde N es el término comúnmente usado para referirse al método (S-N) de ordenadas discretas. Estas direcciones aproximan las integrales usando una regla de cuadratura numérica, una cuadratura de niveles simétricos es usado en este trabajo [9]. Implementando diferencias finitas a las derivadas espaciales en la Ecuación (1), la ecuación discretizada de transferencia para una dirección m y para un volumen de control dado es:

$$I_{p,m} = \frac{|\mu_m|AI_{\gamma,m} + |\xi_m|BI_{\gamma,m} + \alpha I_{\gamma,m-1/2} + \beta S_m V}{D} \quad (2)$$

donde μ y ξ son los cosenos directores de la dirección m ; los subíndices p y γ denotan promedio y referencia, (conocida), respectivamente; A, B, α, V y D son constantes que pueden ser determinadas para cada volumen de control y dirección involucrada [6]; y S_m está dada por:

$$S_m = (1-w)I_b(T_p) + \frac{w}{4\pi} \sum_{m'=1}^M I_{p,m'} \Phi_{m',m} W_{m'} \quad (3)$$

Una vez que la intensidad promedio $I_{p,m}$ ha sido determinada, las intensidades finales, (desconocidas), pueden ser evaluadas mediante:

$$aaI_{f,m} + (1-aa)I_{\gamma,m} = I_{p,m} \quad (4.a)$$

$$bbI_{f,m} + (1-bb)I_{\gamma,m} = I_{p,m} \quad (4.b)$$

$$ccI_{f,m+1/2} + (1-cc)I_{\gamma,m-1/2} = I_{p,m} \quad (4.c)$$

donde aa, bb y cc son constantes que pueden ser determinadas para cada volumen de control y dirección involucrada [6]

Un conjunto de ecuaciones similares a la Ecuación (2) es escrito para cubrir las restantes direcciones y usado para construir un código numérico que resuelve para $I_{p,m}$. Las ecuaciones discretizadas involucran $I_{\gamma,m \pm 1/2}$, las cuales dependen de la $I_{\gamma,m-1/2}$, inicial para cada nivel ξ . Una escogencia inicial para $I_{\gamma,m-1/2}$, en cada nivel ξ es colocar ésta igual a la primera $I_{p,m}$ para cada volumen de control. Soluciones iterativas son requeridas ya que $I_{p,m}$ aparece en ambos lados de las ecuaciones: el término fuente S_m es así mismo una función de la intensidad promedio. De particular importancia para este trabajo es el hecho de que las Ecuaciones (2) y (4) involucran un procedimiento de marcha (que implica una clara dependencia), en el dominio geométrico y en la cuadratura (que como ya se mencionó en el párrafo anterior también

involucra dependencia). Cualquier intento de subdividir el dominio o la cuadratura en bloques a ser resueltos por diferentes procesadores se enfrentará por lo tanto con un pase de mensajes intensivo.

ALGORITMO PARALELO DESARROLLADO EN ESTE TRABAJO

El algoritmo desarrollado en este trabajo ha sido diseñado usando un modelo de programación de pase de mensajes y ha sido implementado usando la librería MPI como la interfaz de pases de mensaje. Esta librería usa la estrategia de cálculo maestro/esclavo. El procedimiento comúnmente adaptado en los algoritmos para resolver la Ecuación de Intercambio Radiante sigue una marcha a través de los volúmenes de control en el dominio considerado. La Ecuación de Intercambio Radiante es resuelta para cada volumen de control y las intensidades en la frontera son evaluadas para el próximo volumen de control basado en un esquema de diferencias apropiado [6, 8, 10]. Esta técnica representa un procedimiento secuencial inherente el cual no se presta para el procesamiento en paralelo mediante el pase de mensajes. Con el fin de superar esta limitación se ha implementado un algoritmo que consiste en descomponer la cuadratura a usar en grupos independientes y asignar éstos a los procesadores que van a realizar los cálculos de acuerdo a la cantidad de direcciones en cada grupo [11]. Este algoritmo permite una disminución en tiempo computacional debido a la minimización de la comunicación entre los procesos. La distribución de los diferentes grupos dependiendo del orden de la cuadratura permite, distribuir la carga en forma equilibrada a través de los procesadores. Esto constituye una ventaja poderosa en el área de la computación ya que problemas de balanceo de carga son evitados. A continuación se describe, a modo de ejemplo, el procedimiento seguido para la asignación de grupos a los procesadores para la cuadratura S-6 (Grupos I al VI):

1. El grupo máximo es de 6 componentes. Luego no se debe paralelizar con menos de 6 direcciones por procesador, D/P.
2. Con un solo procesador , sin considerar el maestro, M, se tendrán 24 direcciones, luego el procesador único tendrá que resolver los VI grupos.
3. Con dos procesadores más el maestro se tendrán 12 D/P, Ejemplo:
P1 resuelve los grupos I, II y III
P2 resuelve los grupos IV, V y VI
4. Con tres procesadores más el maestro se tendrán 8 D/P, Ejemplo:
P1 resuelve los grupos I y III
P2 resuelve los grupos IV y VI
P3 resuelve los grupos II y V
5. Con cuatro procesadores más el maestro se tendrán 6 D/P y se alcanza el máximo número de procesadores. Ejemplo:
P1 resuelve el grupo III
P2 resuelve el grupo VI
P3 resuelve los grupos I y II
P4 resuelve los grupos IV y V

Como fue discutido en la sección anterior, ya que $I_{p,m}$ aparece en ambos lados de las ecuaciones, soluciones iterativas son requeridas hasta que se satisfaga un criterio de

convergencia. Una vez que los grupos han sido asignados a los procesadores ellos determinan su error relativo y función fuente. Estas dos cantidades son enviadas al procesador maestro quien se encarga; de efectuar la suma de cada uno de los errores provenientes de cada procesador para determinar el error global y así determinar si se satisface el criterio de convergencia y efectuar la suma de las funciones fuente provenientes de cada procesador para determinar la contribución total. Esta función fuente, contribución total, es enviada desde el maestro a cada uno de los procesadores, para la próxima iteración. Cuando el criterio de convergencia se satisface, cada uno de los procesadores envían al maestro las intensidades calculadas para presentar los resultados.

Solución del algoritmo secuencial basado en grupos.

1. Ejecuta las operaciones iniciales tal como, definición del dominio computacional, coeficientes de absorción, extinción y dispersión del medio, temperaturas en las paredes y el medio, orden de la cuadratura, cosenos directores, pesos de la cuadratura y condiciones de frontera.
2. Inicializa los flujos de calor y las intensidades en cada volumen de control a cero y el contador de las iteraciones a uno.
3. Selección de un grupo.
4. Selección de una dirección.
 - (a) Sigue una marcha a través de z y r .
 - (b) Para cada volumen de control calcula las intensidades promedio en el centro del volumen de control y las intensidades en las fronteras.
 - (c) Calcula el error relativo el cual está basado en el cambio de las intensidades promedio en dos iteraciones sucesivas.
5. Aplica las condiciones de frontera y actualiza las intensidades de radiación en las fronteras.
6. Determina si el criterio de convergencia se satisface. Sino, aumenta el contador de iteraciones por uno y retorna al paso 3. En caso contrario imprime los resultados y para el proceso.

La estrategia de paralelización del código serial en cada procesador cubre los pasos 3.-5. Los pasos restantes son evaluados en el procesador maestro.

RESULTADOS

En los resultados a ser presentados en este trabajo, la superficie del cilindro ($r=R$) es negra y caliente, el eje de simetría del cilindro es considerado una frontera especular y las dos tapas del cilindro son negras y frías. El medio participante es gris y frío e isotrópicamente dispersa la energía radiante. El coeficiente de dispersión es 0.7 y el coeficiente de extinción es de magnitud igual a la unidad. Para la geometría del cilindro, $R = 1$ m (radio del cilindro), $2H = 10$ m (altura del cilindro) y una razón de forma de magnitud 5. Un criterio de convergencia de 0.0001 es usado para la solución de la Ecuación de Intercambio Radiante en los resultados presentados. El criterio de convergencia está basado en el cambio porcentual de todas las intensidades en dos iteraciones sucesivas.

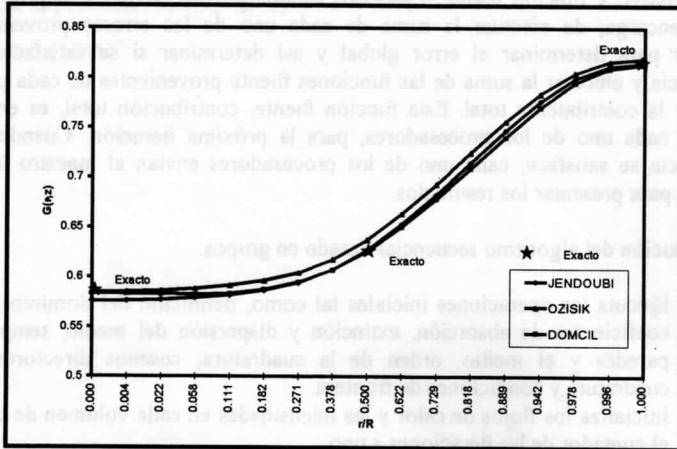


Figura 1. Radiación Incidente promedio en la mitad del plano, Cuadratura S-6, Malla 15x15

Para verificar la precisión del código desarrollado en este trabajo, la solución de la ecuación de transferencia radiante en la mitad del plano del cilindro es comparada, para diferentes conjuntos de cuadraturas, con resultados reportados en la literatura. En la Figura 1, la radiación normalizada en la mitad del plano del cilindro $G(r,z)$, es mostrada para tres conjuntos de cuadratura. DOMCIL (código desarrollado en este trabajo) utiliza la cuadratura reportada en [10] y las otras dos cuadraturas son reportadas por [6, 12]. Como puede observarse, los resultados obtenidos con el código desarrollado en este trabajo se comparan favorablemente con los resultados publicados en la literatura.

Para cuantificar la ejecución del algoritmo paralelo, se ha medido la aceleración paralela, para un ejemplo de granularidad gruesa (cuadratura S-14 y malla 50x50), que indica que tan bien la paralelización es explotada para una arquitectura paralela o que tan bien un algoritmo particular se ajusta a una arquitectura paralela. Esta aceleración es calculada como sigue [13]:

$$Aceleración = \frac{Tiempo(1 Procesador) - Tiempo(N Procesadores)}{Tiempo(1 Procesador)} \tag{5}$$

En la Figura 2, se muestra que el código implementado con MPI y 4 procesadores alcanza una aceleración máxima de 25.7%, el código en PFA alcanza 8.5% con 4 procesadores y en LINDA alcanza un máximo de 1.6% con 7 procesadores. Para el código serial implementado con LINDA se puede observar que a medida que aumenta el número de procesadores, la aceleración permanece prácticamente invariable, esto es, no se perciben ventajas con la paralelización automática realizada por LINDA. La razón fundamental de este

comportamiento es la interdependencia presente en las ecuaciones la cual hace infructuosa la paralelización automática. Con respecto al código serial en PFA, nuevamente, la interdependencia mencionada, como en el caso de LINDA, hace infructuosa la paralelización automática.

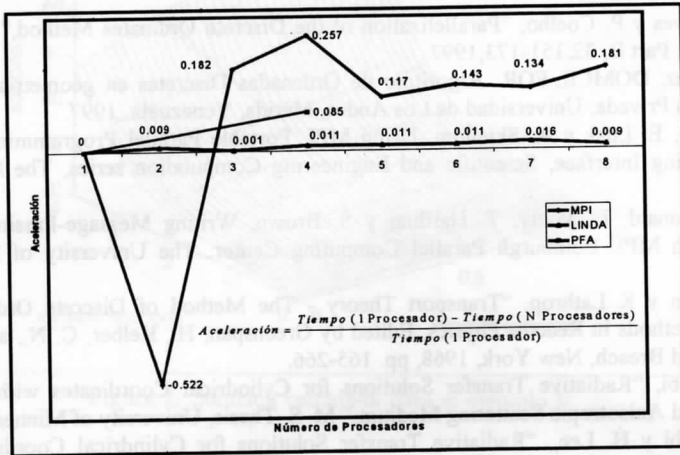


Figura 2. Aceleración. Cuadratura S-14, Malla 50x50.

CONCLUSIONES

Se ha implementado un algoritmo paralelo para resolver la Ecuación de Intercambio Radiante en coordenadas cilíndricas haciendo uso del Método de las Ordenadas Discretas, mediante una descomposición de la cuadratura a usar en grupos independientes y se implementó usando la librería de pase de mensajes MPI en una IMB SP2 con 8 procesadores. Se demostró que la solución de la Ecuación de Intercambio Radiante en coordenadas cilíndricas mediante una descomposición en grupos independientes produjo resultados comparables con los reportados en la literatura. Se determinó la aceleración para un ejemplo con granularidad gruesa y se obtuvo que con cuatro procesadores y ejecutando el código con MPI se tiene la mayor aceleración, es decir, con cuatro procesadores se ejecuta el código en el menor tiempo con respecto al código serial. Esta técnica de desarrollar códigos paralelos en el paradigma de pases de mensajes sin asignar ningún tipo de trabajo al procesador maestro (este procesador solo envía y recibe mensajes) demuestra su poca eficiencia cuando se comparan el código serial contra el mismo código paralelizado en 2 procesadores. En el último caso, el programa se desacelera apreciablemente como consecuencia de la aparición de tiempos de comunicación maestro-esclavo. La intensidad de estas comunicaciones varía, pero siempre se mantiene, al aumentar el número de procesadores. Resulta recomendable, por lo tanto, estudiar

la posibilidad de asignarle trabajo al procesador maestro, minimizando así su pasividad durante los cálculos.

REFERENCIAS

- [1] J. Goncalves y P. Coelho, "Parallelization of the Discrete Ordinates Method," Numerical Heat Transfer, Part B, 32:151-173, 1997.
- [2] A. Sánchez, DOMCIL.FOR: Algoritmo de Ordenadas Discretas en geometría cilíndrica, Comunicación Privada. Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela, 1997.
- [3] W. Gropp, E. Lusk y A. Skjellum, Using MPI. Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface, Scientific and Engineering Computation series, The MIT Press, 1996.
- [4] N. MacDonald, E. Minty, T. Harding y S. Brown, Writing Message-Passing. Parallel Programs with MPI. Edinburgh Parallel Computing Center. The University of Edinburgh, 1996.
- [5] B. Carlson y K Lathrop, "Transport Theory - The Method of Discrete Ordinates," in Computing Methods in Reactor Physics, Edited by Greenspan, H., Kelber, C. N., and Okrent, D., Gordon and Breach, New York, 1968, pp. 165-266.
- [6] S. Jendoubi, "Radiative Transfer Solutions for Cylindrical Coordinates with Emitting, Absorbing, and Anisotropic Scattering Medium," M. S. Thesis, University of Minnesota, 1991.
- [7] S. Jendoubi y H. Lee., "Radiative Transfer Solutions for Cylindrical Coordinates with Emitting, Absorbing, and Anisotropic Scattering Medium," Paper AIAA-92-0123, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1992.
- [8] K. Lathrop, "Spatial Differencing of the Transport Equation: Positivity vs Accuracy," Journal of Computational Physics, Vol. 4, 1969, pp. 475-498.
- [9] W. Fiveland, The Selection of Discrete Ordinates Quadrature sets for Anisotropic Scattering. HTD-Vol. 160, Fundamentals of Radiation Heat Transfer, ASME, pp. 89-96, 1991.
- [10] A. Sánchez, T. Smith y W. Krajewski, "Three-Dimensional Atmospheric Radiation Model Based on the Discrete-Ordinates Method," Journal of Atmospheric Research, Vol. 33, pp. 283-308, 1994.
- [11] A. Sánchez, P. Guillén y C. Torres, "The Discrete Ordinates Method in Cylindrical Coordinates: A New Solution Procedure based on the existence of sets of Independent Directions," Presentado en este mismo evento.
- [12] J. Tsai y M. Ozisik, "Radiation in cylindrical symmetry with anisotropic scattering and variable properties," International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 33, No. 12, pp. 2651-2658, 1990.
- [13] P. Guillén, "Una Implementación Paralela del Método de las Ordenadas Discretas en Coordenadas Cilíndricas," Tesis de Maestría, Universidad de Los Andes, 1997.