

Strutture Dati per il Calcolo Parallelo con Applicazioni alla Fluidodinamica Computazionale

Laureando
Alfredo Buttari

Relatore
Chiar.mo Prof Salvatore Tucci

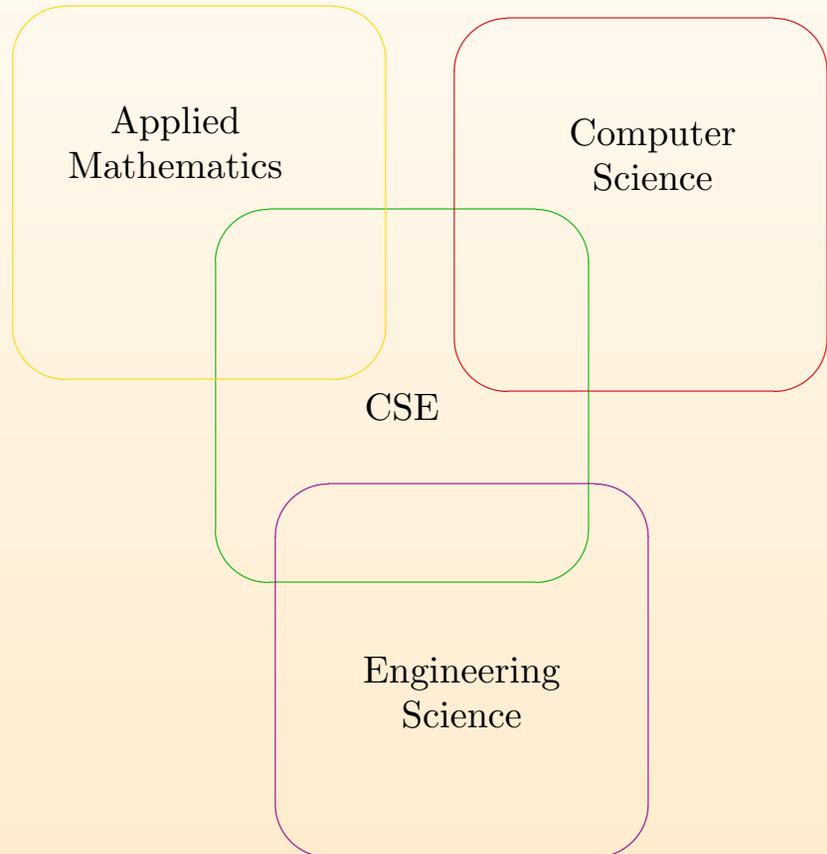
Correlatori
Prof. Gino Bella
Ing. Salvatore Filippone

Computational Science and Engineering

Un approccio multidisciplinare per modellare e risolvere “interessanti” problemi della scienza e dell’ingegneria che richiede elevate risorse computazionali.

Numerical analysis is the study of algorithms for the problems of continuous mathematics

Lloyd N. Trefethen

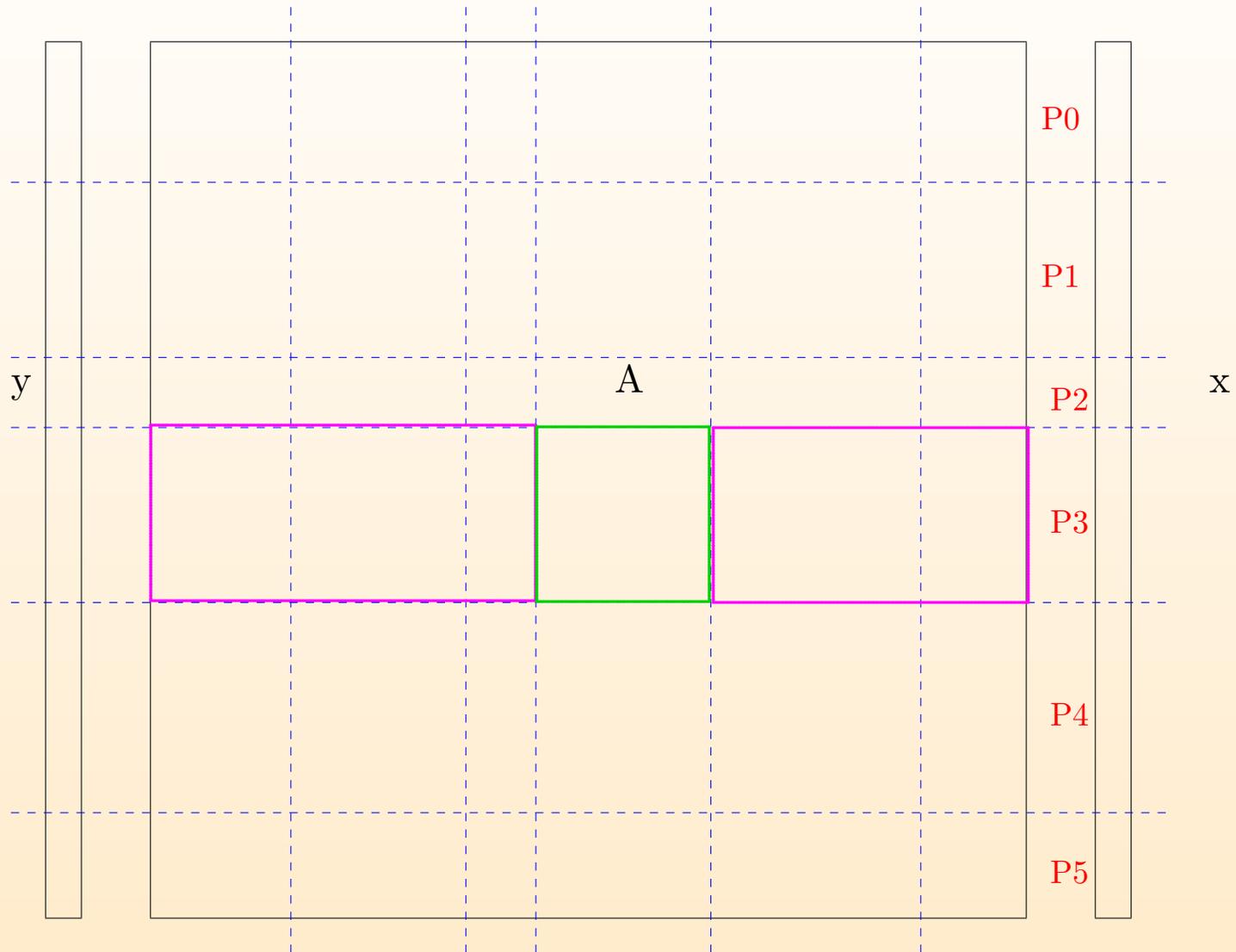


La Libreria PSBLAS

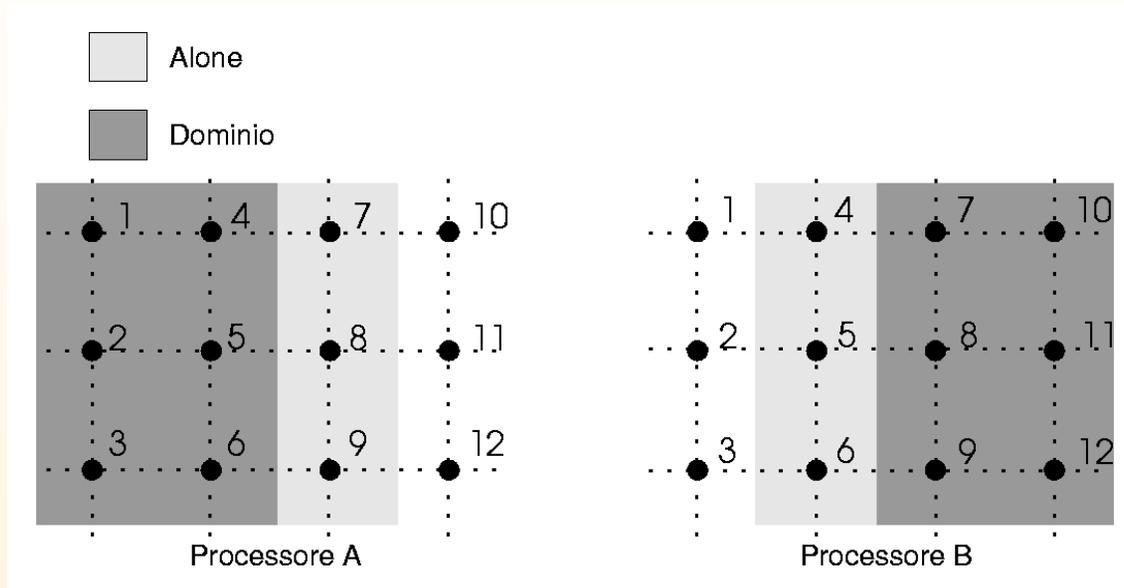
Parallel Sparse Basic Linear Algebra Subroutines

Application	
PSBLAS (Fortran 90)	
PSBLAS (Fortran 77)	
Serial Sparse BLAS	BLACS
	MPI
Device drivers	

Decomposizione dei dati: owner computes



Decomposizione dei dati



Classificazione dei punti della griglia:

Interni Punti che appartengono ad un dominio e interagiscono solo con i punti appartenenti allo stesso dominio;

Frontiera Punti di un dominio che interagiscono con altri domini;

Alone Punti di un altro dominio il cui valore è richiesto;

Overlap Punti che appartengono a più domini.

Operazioni della libreria PSBLAS

Routines computazionali:

- Prodotto matrice sparsa per vettore denso;
- Soluzione di sistema triangolare sparso;
- Norma di matrice e di vettore;
- Somma di matrici dense;
- Prodotto vettoriale

Routines di supporto:

- Allocazione descrittori di comunicazione;
- Allocazione matrici dense e sparse;
- Costruzione e aggiornamento matrici;
- Preprocessamento matrici sparse.

Descrittori di decomposizione

MATRIX_DATA Vettore principale

DEC_TYPE_

M_ Numero totale di equazioni (globale);

N_ Numero totale di variabili (globale);

N_ROW_ Numero di righe locali;

N_COL_ Numero di colonne locali;

CTXT_ Contesto di comunicazione BLACS (globale);

HALO_INDEX_ Lista dei punti di alone

1. Identificativo del processo;
2. Numero di punti da ricevere;
3. Indice dei punti da ricevere;
4. Numero di punti da spedire;
5. Indice dei punti da spedire;

OVLAP_INDEX_ Lista dei punti di overlap

1. Identificativo del processo;
2. Numero di punti da ricevere;
3. Indice dei punti da ricevere;
4. Numero di punti da spedire;
5. Indice dei punti da spedire;

OVLAP_ELEM Per tutti i punti di overlap

1. Indice del punto;
2. Numero di domini che lo condividono;

Formato Coordinate

VAL = coefficienti non nulli di A disposti per righe,
INDX = indici di riga dei coefficienti in VAL,
JNDX = indici di colonna dei coefficienti in VAL,

$$A = \begin{pmatrix} 11 & 0 & 13 & 14 & 0 \\ 0 & 0 & 23 & 24 & 0 \\ 31 & 32 & 33 & 34 & 0 \\ 0 & 42 & 0 & 44 & 0 \\ 51 & 52 & 0 & 0 & 55 \end{pmatrix}$$

Rappresentazione COO:

VAL = (11 13 14 23 24 31 32 33 34 42 44 51 52 55),
INDX = (1 1 1 2 2 3 3 3 3 4 4 5 5 5),
JNDX = (1 3 4 3 4 1 2 3 4 2 4 1 2 5).

Formato Compressed Sparse Row

VAL = coefficienti non nulli della matrice A disposti per righe,
JNDX = indici di colonna dei coefficienti in VAL,
PNTR = indice in VAL dei primi coefficienti non nulli di ciascuna riga di A .

$$A = \begin{pmatrix} 11 & 0 & 13 & 14 & 0 \\ 0 & 0 & 23 & 24 & 0 \\ 31 & 32 & 33 & 34 & 0 \\ 0 & 42 & 0 & 44 & 0 \\ 51 & 52 & 0 & 0 & 55 \end{pmatrix}$$

Rappresentazione CSR:

VAL = (11 13 14 23 24 31 32 33 34 42 44 51 52 55),
JNDX = (1 3 4 3 4 1 2 3 4 2 4 1 2 5),
PNTR = (1 4 6 10 12 15).

Formato Jagged Diagonal

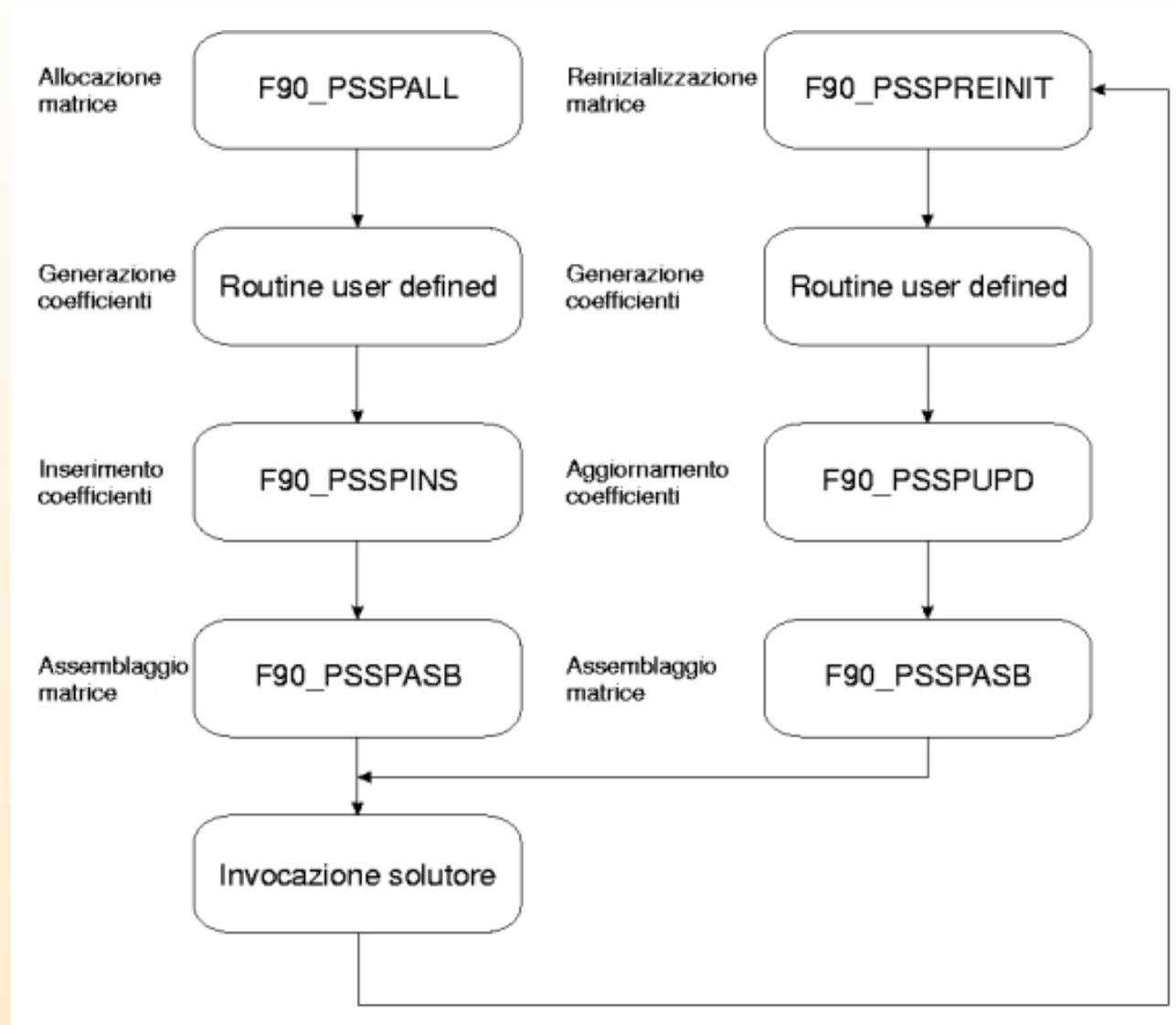
VAL = coefficienti non nulli di \bar{A} disposti per colonne,
JNDX = indici di colonna dei coefficienti in VAL,
PNTR = indici in VAL dei primi coefficienti non nulli di ciascuna colonna di
IPERM = vettore di permutazione della matrice dei coefficienti.

$$A = \begin{pmatrix} 11 & 0 & 13 & 14 & 0 \\ 0 & 0 & 23 & 24 & 0 \\ 31 & 32 & 33 & 34 & 0 \\ 0 & 42 & 0 & 44 & 0 \\ 51 & 52 & 0 & 0 & 55 \end{pmatrix} \quad \bar{A} = \begin{pmatrix} 31 & 32 & 33 & 34 & 0 \\ 11 & 13 & 14 & 0 & 0 \\ 51 & 52 & 55 & 0 & 0 \\ 23 & 24 & 0 & 0 & 0 \\ 42 & 44 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Rappresentazione JAD:

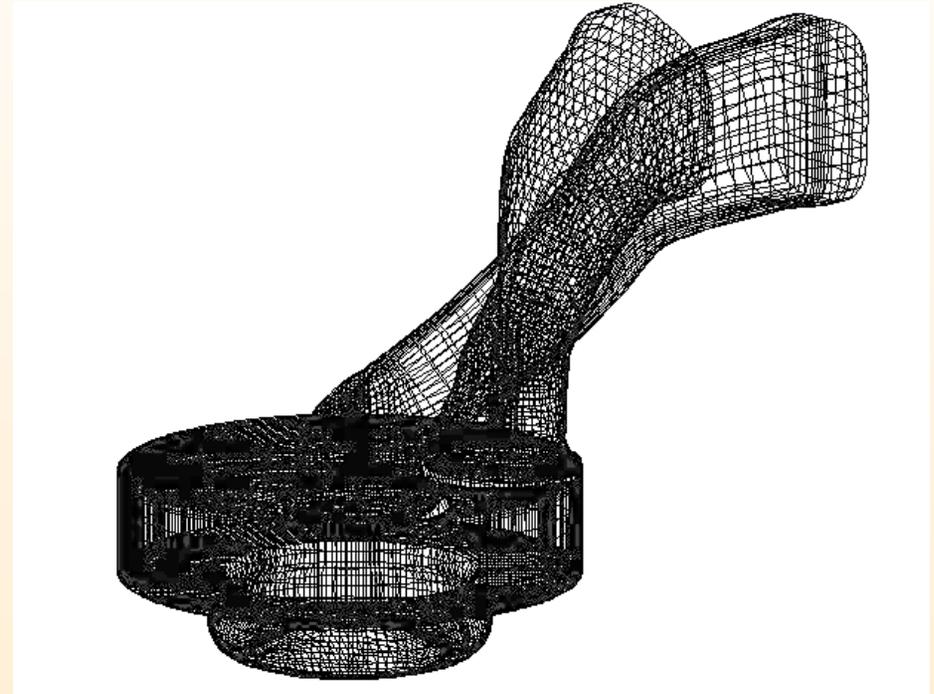
VAL = (31 11 51 23 42 32 13 52 24 44 33 14 55 34),
JNDX = (1 1 1 3 2 2 3 2 4 4 3 4 5 4),
PNTR = (1 6 11 14 15),
IPERM = (3 1 5 2 4).

Rigenerazione

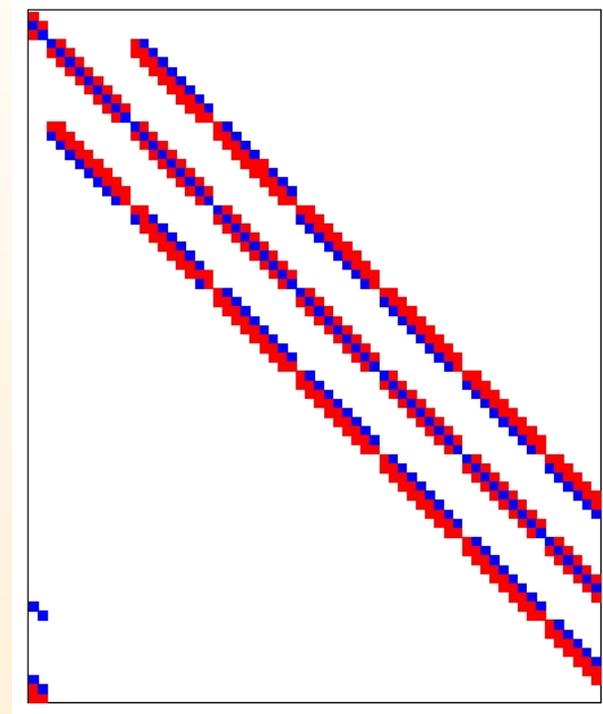
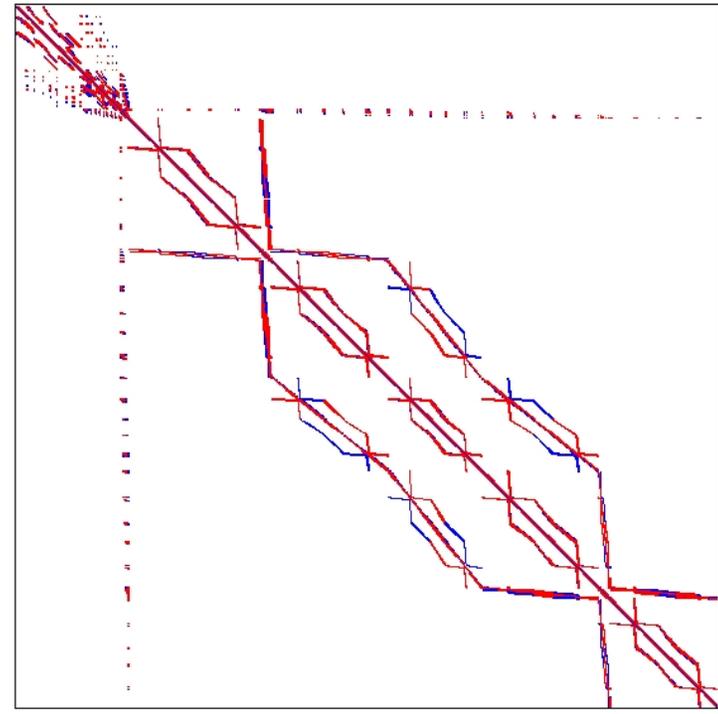


Caso di Studio

- Motore Diesel FIAT HSDI con *piston bowl*
- Metodo di discretizzazione ai “volumi finiti”
- Risoluzione della griglia pari a 100,000 e 200,000 celle
- Equazioni di temperatura, pressione, momento, modello $\kappa - \varepsilon$ della turbolenza
- Cluster di macchine Linux con processore Pentium4 (1.5 GHz) connesse con rete Fast Ethernet



Matrice della temperatura



Forma di sparsità della matrice della temperatura

Simulazione di motori a combustione interna con KIVA-3

Equazioni non stazionarie del moto di una miscela turbolenta e chimicamente reattiva di gas ideali (sistema completo delle equazioni di Navier-Stokes), accoppiate alle equazioni per spray di carburante volatile monocomponente.

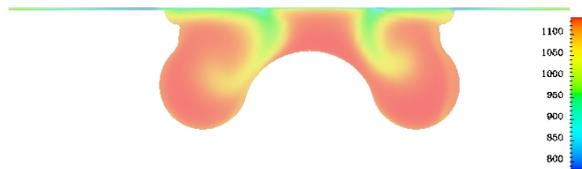
ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian):

- Fase A: termini legati alla dinamica degli spray e alla chimica;
- Fase B: gradiente di pressione nell'equazione del momento e termini legati alla turbolenza e alla diffusione di massa, momento ed energia; in questa fase viene applicato l'algoritmo iterativo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Lnked Equations) la cui convergenza è raggiunta tramite correzione del valore della pressione;
- Fase C (stadio *Euleriano*): termini di convezione (solutori espliciti).

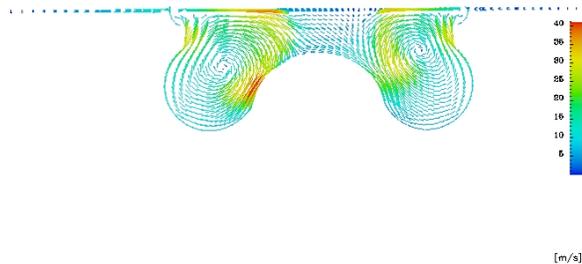
Risultati Sperimentali



Andamento della pressione
al punto morto superiore



Andamento della temperatura
al punto morto superiore



Andamento della velocità
al punto morto superiore

Risultati Sperimentali

Tempi di generazione della matrice della temperatura con griglia da 200,000 celle

Tempi generazione	1p	2p	4p	6p	8p
COO	2.07	1.6733	1.1666	0.93129	0.70343
CSR	1.9229	1.6859	1.0332	0.88125	0.70148
JAD	2.3264	1.9446	1.1904	0.93733	0.73432

Tempi del solutore dell'equazione della pressione con griglia da 200,000 celle e preconditionatore ILU

Tempi solutore	1p	2p	4p	6p	8p
COO	2.0579	1.5220	1.1344	0.94932	0.94510
CSR	1.4328	1.1505	0.9279	0.85486	0.83086
JAD	2.6074	1.6960	1.2154	1.1534	1.0473

Risultati Sperimentali

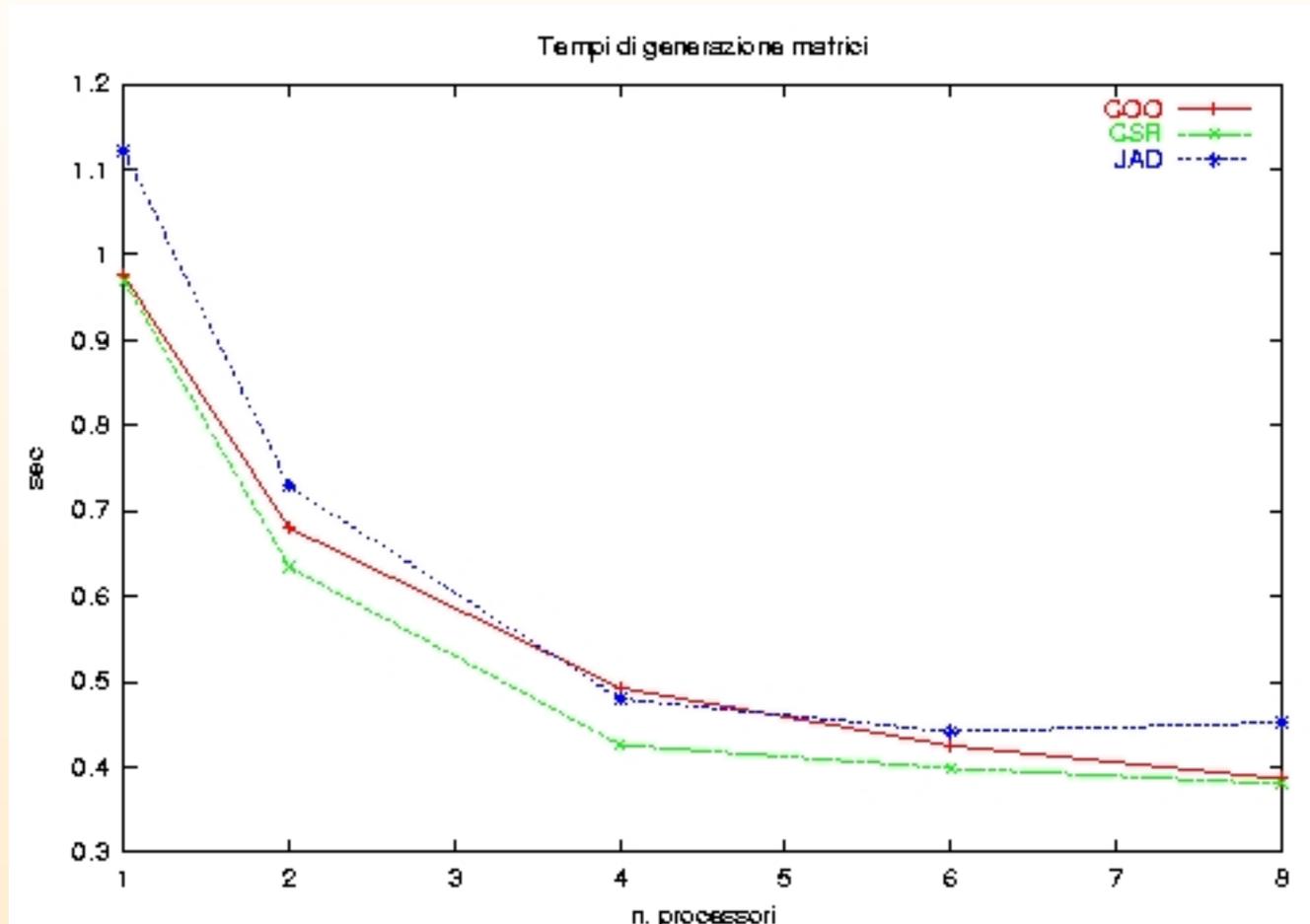


Grafico dei tempi di generazione della matrice della temperatura con griglia da 100,000 celle

Risultati Sperimentali

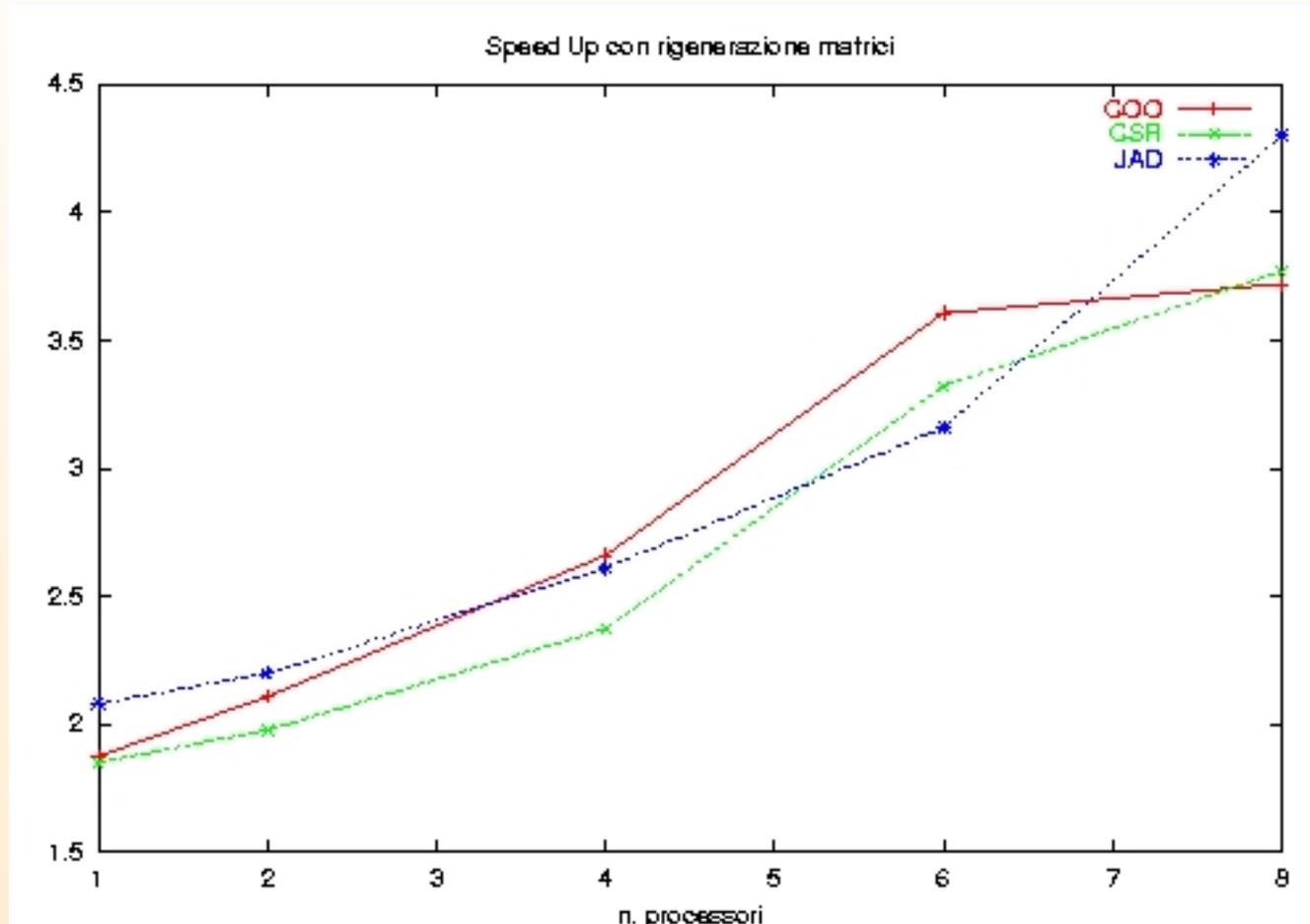


Grafico dello *speed-up* dovuto alla rigenerazione della matrice con griglia da 100,000 celle

Risultati Sperimentali

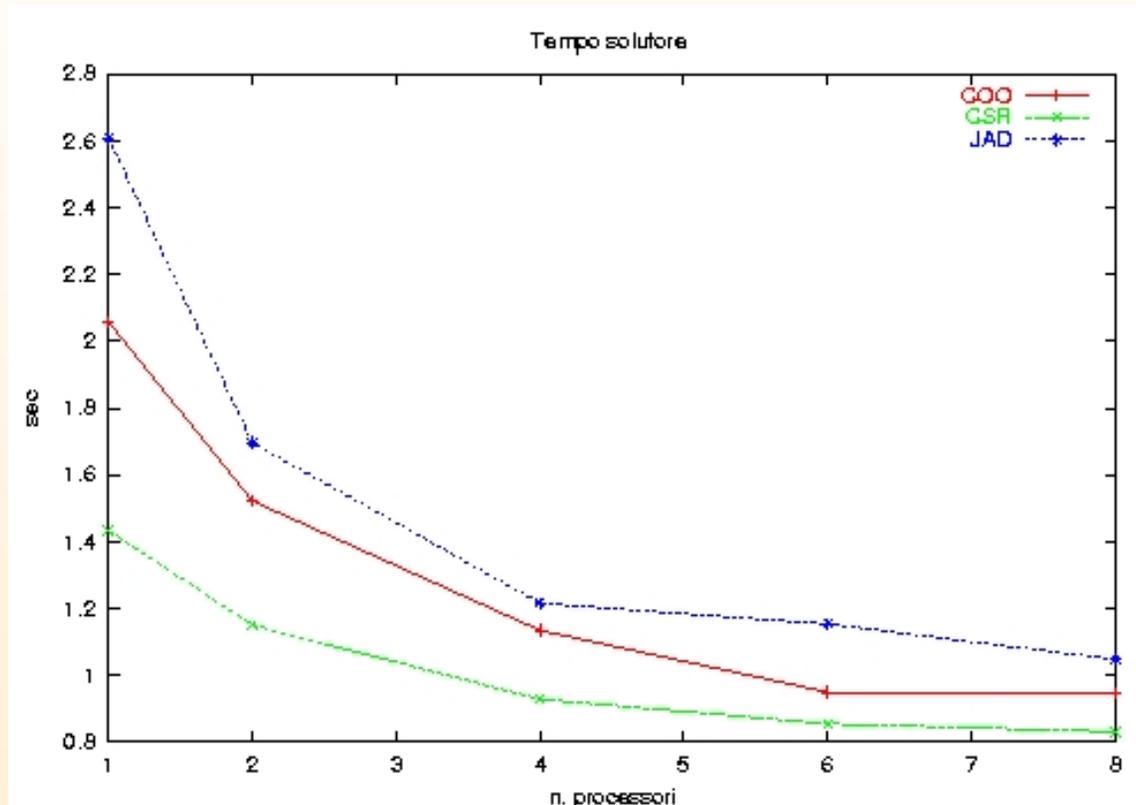


Grafico dei tempi del solutore della pressione con griglia da 200,000 celle e preconditionatore ILU

Risultati Sperimentali

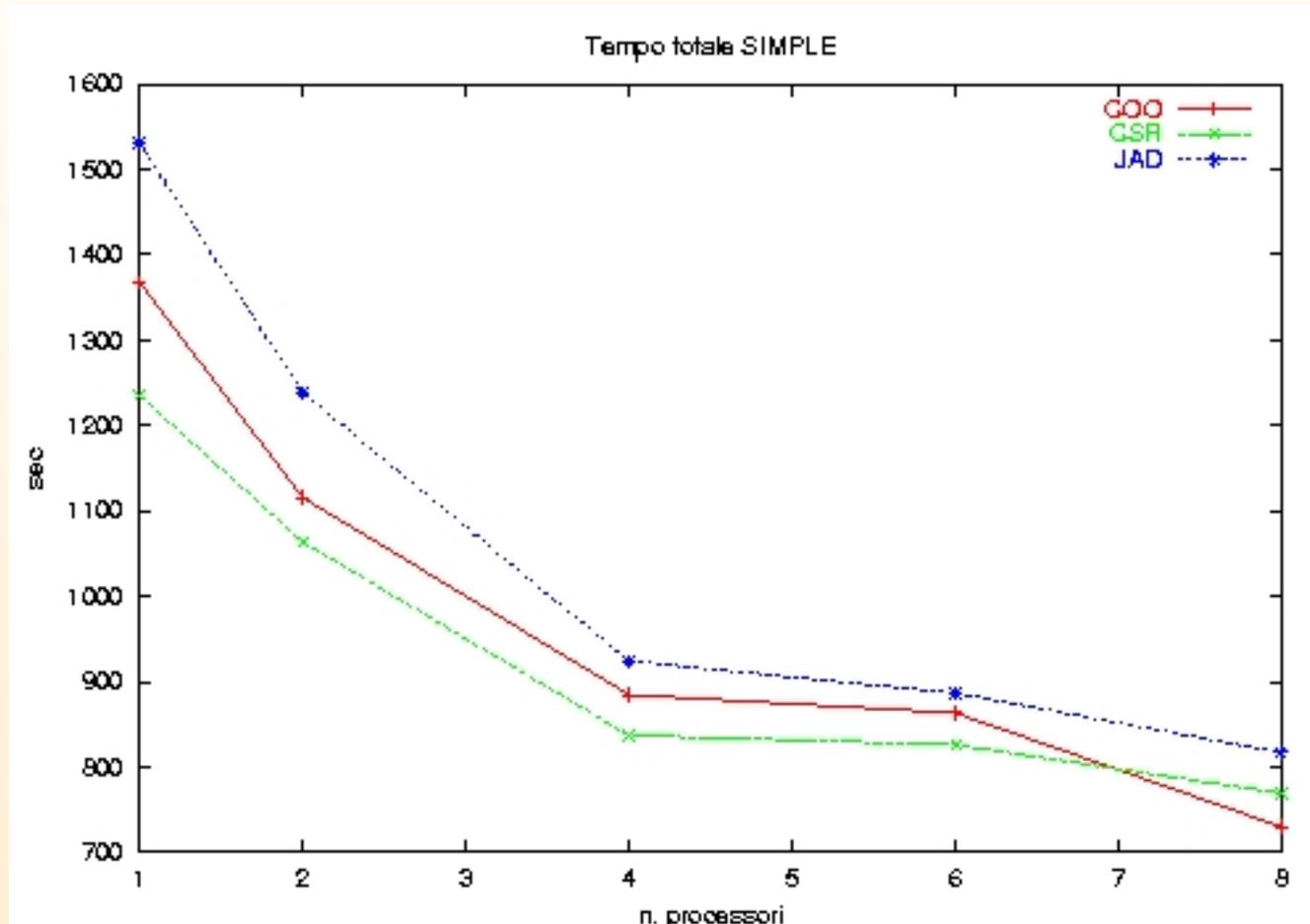


Grafico del tempo totale speso nel ciclo SIMPLE con griglia da 100,000 celle e preconditionatore ILU

Sviluppi Futuri

- Riduzione dei tempi della fase C di KIVA-3
- Supporto alle griglie non strutturate fortemente adattative
- Introduzione paradigma di programmazione parallela ibrido