

Análise de Desempenho Paralelo de Modelos de Difusão de Contaminantes em Água

Eduardo Verissimo Faccio, Pedro Figueiredo Dias,
Pedro Henrique de Oliveira Masteguin

¹Instituto de Ciência e Tecnologia – Universidade Federal de São Paulo (UNIFESP)
São José dos Campos – SP – Brasil

{verissimo.eduardo, pedro.figueiredo, p.masteguin}@unifesp.br

1. Introdução

A contaminação de corpos d'água, tais como lagos e rios, é um grande desafio ao meio ambiente e a saúde pública, sendo preciso entender a dispersão do contaminante no ambiente para poder realizar qualquer intervenção de mitigação. Dessa forma, este trabalho foca na modelagem numérica da difusão de poluentes em uma matriz bidimensional, utilizando o método de diferenças finitas para aproximar a equação de difusão discreta:

$$C_{i,j}^{t+1} = C_{i,j}^t + D \cdot \Delta t \cdot \left(\frac{C_{i+1,j}^t + C_{i-1,j}^t + C_{i,j+1}^t + C_{i,j-1}^t - 4 \cdot C_{i,j}^t}{\Delta x^2} \right) \quad (1)$$

Nesta equação, $C_{i,j}^t$ representa a concentração do contaminante na célula (i, j) no instante t , D é o coeficiente de difusão, Δt o intervalo de tempo discreto e Δx o espaçamento espacial. O objetivo principal é desenvolver uma simulação que modele a difusão de contaminantes aplicando programação paralela para acelerar os cálculos e analisar o comportamento dos poluentes ao longo do tempo. Serão comparadas as versões sequencial e paralela do algoritmo, utilizando OpenMP, CUDA e MPI para explorar o processamento simultâneo em múltiplos núcleos e dispositivos. Os resultados serão validados por meio de mapas de calor, gráficos de speedup e eficiência, além da comparação das matrizes geradas. Este estudo demonstra como técnicas de programação concorrente e distribuída podem otimizar simulações numéricas complexas, reforçando os conceitos aprendidos na disciplina e demonstrando sua aplicação prática no desenvolvimento de soluções eficientes.

2. Implementação do Algoritmo

2.1. Código Sequencial

O código sequencial implementa a solução numérica da equação de difusão usando uma abordagem serial. Utilizando-se do método de diferenças finitas, é simulado a dispersão de uma substância em uma matriz bidimensional. Cada célula da matriz representa a concentração de uma substância em um ponto do espaço.

O cálculo é realizado em um laço de repetição que itera sobre todas as células da matriz. A atualização de cada célula depende da média das concentrações dos seus vizinhos imediatos e de parâmetros físicos como coeficiente de difusão, o intervalo de tempo Δt e o espaçamento espacial Δx .

2.2. Código Paralelo em CUDA

O código paralelo em CUDA implementa uma versão otimizada do algoritmo de difusão, explorando a capacidade de paralelização massiva das GPUs. A CUDA (Compute Unified Device Architecture) permite distribuir o cálculo de atualização das células da matriz de concentração entre milhares de threads executadas simultaneamente. Cada thread é atribuída a uma célula específica da matriz, realizando cálculos independentes e simultâneos para atualizar os valores conforme o método de diferenças finitas.

O kernel `diffusion_kernel` é responsável por realizar o cálculo da nova concentração de cada célula com base nos valores dos seus vizinhos imediatos. Esse kernel é executado por uma grade (*grid*) de blocos de threads, cujas dimensões são configuráveis para melhor aproveitamento dos recursos da GPU. A utilização de memória compartilhada (`__shared__`) permite acelerar a soma das diferenças das concentrações, essencial para verificar a convergência do algoritmo.

O fluxo de execução consiste nas seguintes etapas:

- **Inicialização (`cuda_init`):** Aloca memória na GPU e transfere os dados iniciais da CPU para a GPU.
- **Execução do kernel (`cuda_diff_eq`):** O kernel é executado, atualizando os valores da matriz e calculando a diferença média entre as iterações.
- **Recuperação de Dados (`cuda_get_result`):** Transfere os resultados da GPU de volta para a CPU.
- **Finalização (`cuda_finalize`):** Libera a memória alocada na GPU.

A configuração das dimensões dos blocos de threads pode ser ajustada através da função `set_block_dimensions`, permitindo experimentar diferentes granularidades de paralelismo e desempenho, equilibrando a carga de trabalho entre os multiprocessadores da GPU.

2.3. Interface Python e ferramenta CMake

Assim como na implementação em OpenMP, o projeto utiliza o CMake para a compilação do código CUDA, facilitando a definição de dependências e o processo de build. A integração com Python é realizada utilizando o módulo `ctypes`, que permite o carregamento dinâmico da biblioteca CUDA compilada e a chamada de suas funções diretamente em Python.

A classe `CUDADiffusionEquation` implementa a interface Python para a solução da equação de difusão. Essa classe gerencia a inicialização da GPU, a execução dos kernels CUDA e a liberação de recursos, garantindo uma execução eficiente e segura. A interface permite configurar parâmetros como o tamanho da matriz, coeficiente de difusão e as dimensões dos blocos de threads. Com essa integração, é possível comparar diretamente o desempenho entre as implementações sequencial, OpenMP e CUDA, aproveitando a flexibilidade do Python para realizar análises e visualizações dos resultados.

3. Resultados

Nesta seção, apresentamos os resultados obtidos de nossa implementação. Inicialmente, analisamos a equivalência lógica entre os códigos sequencial e paralelo, considerando

possíveis erros que podem surgir na paralelização, como condições de corrida ou inconsistências de sincronização. Em seguida, ilustramos, por meio de mapas de calor, a atualização dos valores da matriz ao longo do tempo. Por fim, realizamos uma análise comparativa dos tempos médios de execução, *speedup* e eficiência entre as duas versões.

3.1. Validação da Implementação - Numérico

Para assegurar a correção das duas implementações, verificamos em cada iteração se os valores presentes em cada célula da matriz são idênticos. Dessa forma, o resultado na última iteração deve ser o mesmo em ambas as versões.

Por meio desse procedimento, utilizando a interface Python em conjunto com um Jupyter Notebook, comprovamos que as duas soluções produzem resultados idênticos. Isso era esperado, pois no código paralelo não ocorrem condições de corrida, uma vez que a escrita não é realizada na mesma região de memória das leituras, tornando o processamento de cada célula pelas *threads* independente.

3.2. Validação da Implementação - Ilustrativo

Para ilustrar o funcionamento da implementação, foram gerados mapas de calor, representado pela Figura 1, nos quais cada ponto de uma matriz 50×50 é representado por uma cor distinta. Cores escuras correspondem a valores próximos de um, indicando alta concentração do contaminante, enquanto cores claras representam valores próximos de zero, indicando baixa presença de contaminação.

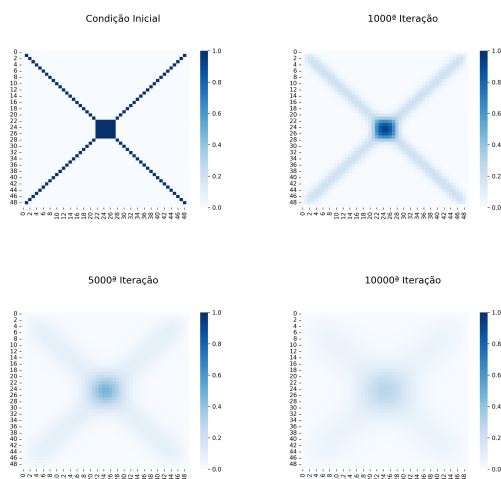


Figura 1. Mapa de calor em quatro instantes distintos da simulação.

Analisando a progressão dos mapas de calor, observamos que o comportamento faz sentido no contexto da solução proposta. Inicialmente, o contaminante é adicionado com alta concentração nas diagonais e no centro da matriz, evidenciado pelas regiões azuis-escuros. Com o avanço das iterações, o contaminante começa a se difundir para as regiões adjacentes, aumentando gradativamente a luminosidade nessas áreas e diminuindo nos pontos de concentração inicial. Na última iteração, a concentração se distribui uniformemente pela matriz, com valores próximos entre si.

3.3. Análise de Desempenho

A análise de desempenho foi realizada em um computador *desktop* com as especificações apresentadas na Tabela 1. Ademais, as especificações dos parâmetros do problema foram incluídas na Tabela 2.

Tabela 1. Tabela de especificação de Hardware

Especificações	Detalhes
Processador	Intel i7-7500U @ 2.7GHz-3.5GHz
Núcleos / Lógicos	2 / 4
Memória RAM	10 GB
Sistema Operacional	Ubuntu 22.04.05 (via WSL)

Tabela 2. Tabela de especificação da Simulação

Especificações	Detalhes
Dimensão da Matriz (N x N)	3000 x 3000
Número de Iterações	1000
Distribuição Inicial	Alta concentração no centro
Coeficiente de Difusão	0.1
Δt	0.01
Δx	1.0

Para obter valores mais consistentes e minimizar influências externas, como outros programas em execução, cada teste foi executado quinze vezes e, assim, calculamos o tempo médio gasto e seu desvio padrão. O *speedup* é calculado dividindo-se o tempo de execução sequencial pelo tempo de execução CUDA correspondente.

Tabela 3. Tabela de comparação de desempenho entre o código sequencial e o utilizando CUDA.

Experimento	Tempo	SpeedUp
Sequencial	124.10 ± 3.86	1.0
OMP (4 Threads)	62.89 ± 2.38	1.97
CUDA(16, 16)	23.32 ± 0.52	5.32
CUDA(32, 32)	25.05 ± 0.49	4.95

A visualização dos dados por meio de gráficos de *boxplot* (Figura 2) é um ótimo meio para avaliar o desempenho do algoritmo, considerando as possíveis incertezas que advêm do sistema computacional em que ele está inserido. Problemas de priorização de tarefas, alocação de recursos e utilização do sistema pelo usuário podem introduzir variações significativas no tempo de execução e na eficiência geral do algoritmo. Essas flutuações são facilmente identificadas por meio dos gráficos, ilustrando que existe uma pequena diferença de poucos segundos que podem influenciar no tempo de execução final do programa.

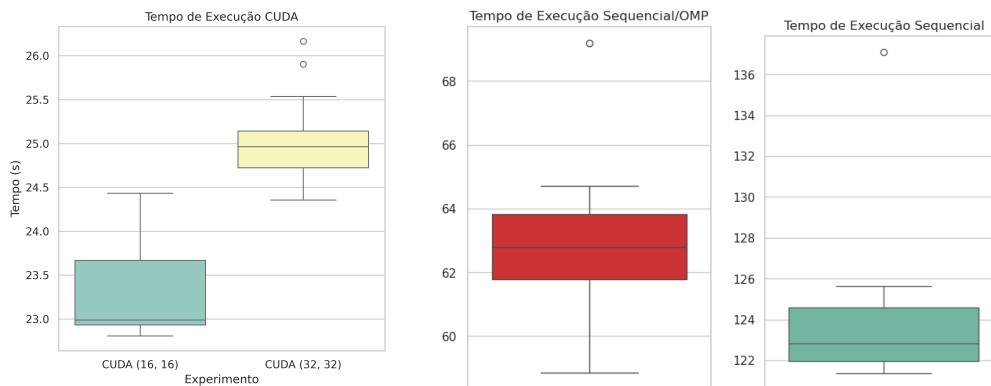


Figura 2. Gráficos *boxplots* para os tempos de execução medidos para cada um dos experimentos registrados na Tabela 3.

Nota-se uma grande eficiência do tempo de execução do algoritmo de CUDA em relação ao sequencial e OpenMP, o que demonstra o quão importante esse hardware pode ser para tarefas que demandam cálculos extremos, como os de aprendizado de máquina, por exemplo. Porém, importante ressaltar que esse ganho será menor se o tamanho da simulação for reduzido, já que todo o processo de alocar, enviar e receber dados e administrar a GPU possui um custo, que pode ser evitado ao utilizar apenas as threads da própria CPU.

O desempenho inferior do CUDA com *block dim* (32, 32) em relação ao (16, 16) ocorre porque blocos maiores podem causar um maior uso de recursos, como memória compartilhada e registradores, levando à saturação da capacidade da GPU. Isso resulta em maior latência devido à competição entre blocos por recursos limitados.

4. Conclusão

Com a introdução da implementação paralela utilizando CUDA, além da sequência e da versão OpenMP previamente analisadas, validou-se a correção dos resultados ao longo das diferentes abordagens e examinou-se o impacto do paralelismo no tempo de execução. Os experimentos demonstraram que, embora a paralelização com CUDA proporcione ganhos significativos em relação ao código sequencial, podem existir limitações na escalabilidade, que são decorrentes de *overheads* de comunicação entre a CPU e a GPU, latências de memória e restrições arquiteturais do próprio hardware gráfico.

Dessa forma, o estudo evidencia não apenas as vantagens práticas da paralelização em termos de desempenho e eficiência em simulações numéricas, mas também resalta a importância de se compreender os desafios inerentes às diferentes estratégias paralelas. A experiência com CUDA complementa os conceitos fundamentais aprendidos em programação concorrente e distribuída, oferecendo percepções valiosas sobre a aplicabilidade e os limites da aceleração por GPU em contextos computacionais exigentes.

Referências

- Crank, J. (1979). *The Mathematics of Diffusion*. Oxford science publications. Clarendon Press.
- Rauber, T. and Runger, G. (2013). *Parallel Programming*. Springer.