

Space-Time Window Reconstruction in Parallel High Performance Numeric Simulations. Application for CFD

Reconstructia de ferestre spatiu-timp in simulari numerice paralele de inalta performanta. Aplicatie pentru CFD

teza de doctorat elaborata de

Ing. Anton Alin-Adrian

conducator stiintific: Prof. Dr. Ing. Cretu Vladimir-Ioan

REZUMAT

Subiectul abordat in teza reprezinta una din cele mai serioase provocari din domeniul computatiei de inalta performanta. Lucrarea trateaza problematica gestionarii rezultatelor numerice de dimensiuni mari, provenite in urma unor simulari numerice complexe, cu retele de discretizare fine, si se intinde pe 10 capitole.

In cel dintai, este expusa motivatia si problematica subiectului abordat spre cercetare, precum si obiectivele propuse. Este atasata, de asemenea, o scurta descriere a structurii tezei.

Tehnica moderna de calcul, de la aparitia ei in 1938 si pana in prezent, a cunoscut o crestere exponentiala de performanta. Capacitatea de a gestiona datele generate prin computatie de inalta performanta, a fost insa si este in fiecare zi cu mult depasita. Supercalculatoarele sunt asemenea unor postalioane a caror armasari alearga mult mai repede decat transportul. Centrele de calcul sunt „acvarii virtuale” in interiorul carora utilizatorul poate construi cele mai performante submarine, pentru ca apoi sa se limiteze la a le privi prin fereastra, fara sa le poata muta.

Al doilea capitol prezinta strategia aleasa de autor pentru a intelege notiunile elementare ale computatiei de nivel inalt. Sunt utilizate tehnici neconventionale in acest sens, de data mining, pe un esantion de aproximativ 6000 de articole stiintifice publicate in reviste si jurnale de specialitate. Este prezentata o viziune originala asupra „calculului in stiinta si inginerie”, ca fiind o subramura de frontiera in stiinta calculatoarelor, destul de recent publicata ca atare in 1994. Pana atunci, aceasta disciplina a fost tratata ca fiind exclusiv o subramura a matematicii aplicate.

In aceasta teza sunt vizate datele mari de provenienta numerica. Solutiile prezente in literatura de specialitate, acoperind stiinta calculatoarelor, matematica aplicata si mecanica fluidelor computationala, sunt lipsite de interdisciplinaritatea necesara pentru a strapunge problema pana la radacina ei.

In Capitolul 3, sunt analizate in profunzime aceste trei scoli de gandire, concluzionandu-se ca abordarile curente se multumesc sa frizeze provocarea la suprafata si ca nu au potential suficient pentru o interventie hotaratoare. Din aceasta cauza, autorul propune un nou concept, denumit „reconstructia unei ferestre spatiu-timp”, asezat la confluenta dintre cele trei discipline.

O fereastra spatiu-timp reprezinta o simulare numerica noua, independenta, acoperind un subdomeniu de analiza in spatiu si timp, si avand

ca punct de plecare rezultatele dintr-o versiune anterioara, globala. Capitolul 4 propune doua solutii de implementare ale noului concept. Fiind un subiect complex, in Capitolul 5 este prezentata si strategia elaborata pentru rezolvarea lui. Este dezvoltata o abordare in treapta, pe nivele crescande de dificultate, pornind de la cazurile cele mai simple, si culminand cu situatii complexe, de nivel industrial.

Capitolul 6 are rol de a demonstra, pe un caz particular foarte simplu de element finit, daca intregul concept este sau nu functional in mecanica fluidelor computationala.

Apoi, in Capitolul 7, este reimplementata solutia pentru programul OpenFOAM, intr-un caz de test cvasi-3D, prezentand o curgere rotatională, cu metoda volumului finit.

Capitolul 8 trateaza un caz 4D, pentru o curgere turbulenta, nestationara, analizata in toate cele 3 dimensiuni. Sunt expuse si detalii de implementare, si artificii algoritmice la s-a recurs pentru a putea depasi barierele de performanta in gestiunea numarului mare de interpolari. Rezultatele demonstreaza ca procesul de reconstructie este corect, si in urma lui se obtin nu doar aceleasi caracteristici ale curgerii (ie. vartejuri Karman), ci, pentru cazul de fata, intocmai aceleasi campuri ca si in simularea globala. Mai mult, solutia ofera utilizatorului libertate maxima in procesele de post-procesare.

De interes deosebit in acest capitol este si problematica interpolarii in timp. Pentru cazurile in care se pot interpola conditiile la limita in timp, se poate reduce considerabil numarul de pasi de timp, din fereastra spatiu-timp, care necesita stocare. Autorul dezvolta un studiu de caz special conceput pentru a pune in evidenta constrangerile necesare, insa argumenteaza ca identificarea unui fenomen natural corespunzator, este o problema de natura fizica. Identificarea unui fenomen pentru care intrarile in fereastra spatiu-timp sa fie relativ constante sau liniare in timp, este o problema care ramane de investigat.

Capitolul 9 abordeaza conceptul de "reconstructie a unei ferestre spatiu-timp" printr-o solutie radical diferita, folosind interceptarea traficului interprocesor care are loc in simularile numerice mari. Pentru aceasta se trece la descompunerea manuala a domeniului de analiza, urmand o reteta de rafinament local al retelei de discretizare, dezvoltata de autor. Sunt obtinute, cu acuratete deplina, aceiasi biti in fereastra reconstruita ca si in simularea globala. Dezavantajul consta in faptul ca aceasta solutie nu ofera mai multa flexibilitate decat cele existente pana acum. Ofera insa, dupa cum autorul demonstreaza, rate de compresie net superioare, atunci cand conditiile de utilizare pot fi satisfacute, conform cu reteta proprie dezvoltata.

Autorul demonstreaza doua implementari ale noului concept de „reconstructie a ferestrei spatiu-timp”, gandite pentru facilitati diferite, dar cu un scop comun. Ultimul capitol concluzioneaza si cantareste rezultatele obtinute pentru cele doua metode. In final, este propusa o procedura unitara, alcatuita din doua etape, si principiile de aplicare ale acesteia pentru a rezolva eficient inundatia cu date numerice provenite din simulari mari. In esenta, se aplica mai intai „solutia B” pentru a aduce partile importante din simulare pe calculatorul personal, dupa care se aplica „solutia A” pentru a rafina si studia indeaproape fenomenele care au loc in fereastra spatiu-timp selectata.

Pentru exemplul analizat, datele numerice sunt reduse de 2x pana la 6% sau mai mult, conform cu reteta de utilizare.

Contributii personale:

- teza deschide o noua directie de cercetare, punand bazele unei reale schimbari de paradigma in modul cum sunt executate si prelucrate simularile numerice de mari dimensiuni, prin intermediul unui concept nou, denumit „reconstructia unei ferestre spatiu-timp”;
- se folosesc metode neconventionale pentru a produce o viziune originala asupra tinerei subramuri din stiinta calculatoarelor, denumita aici „computatie in stiinta si inginerie” (CiSE);
- sunt aprofundate scoli diferite si independente de gandire, pentru a identifica cele mai eficiente solutii tehnice din fiecare;
- este dezvoltata o metodologie noua, sub forma unei proceduri unitare de rezolvare a inundatiei cu rezultate numerice, in doua etape: „solutia B” transporta mai intai partile esentiale ale simularii din centrul de calcul pe calculatorul personal, pentru ca apoi „solutia A” sa poata oferi flexibilitate si manevrabilitate maxima in post-procesare;
- sunt dezvoltate unelte software noi, pentru a putea valida noul concept introdus;
- este proiectata si implementata o solutie functionala de reducere a dimensiunii datelor, aplicata cu succes la simulari numerice reale, de nivel industrial;

Activitati de cercetare si publicatii in tematica tezei:

- Stagiul doctoral la Universitatea din Stuttgart, Institutul de Mecanica Fluidelor si Turbomasini (IHS), mai-iulie 2010.
- Acces la centrul de calcul din Stuttgart (HLRS), prin intermediul retelei bwGRID, iunie 2010 – iunie 2011.
- Beneficiar bursa de doctorat POSDRU 6/1.5/S/13 2008, ID 6998.
- 5 lucrari publicate la conferinte ISI Proc, dintre care 4 indexate si in IEEE Xplore, 2 fiind deja indexate in ISI Proc
- participare la 4 workshop-uri internationale, din care 2 in strainatate (Gothenburg , Suedia si Stuttgart, Germania)
- 4 rapoarte interne (de doctorat), din care 1 prezentat la Universitatea din Stuttgart
- 2 alte lucrari indexate IEEE Xplore