



DIRECTOR,

Academia Română
Institutul de Geodinamică "Sabba S. Ștefănescu"
Laboratorul Dinamica Globului Terestru

Dr. Crișan DEMETRESCU
Membru corespondent al Academiei Române

Str. Jean-Louis Calderon, Nr. 19-21, București-37, România, R-020032,
fax:(4021) 317.2120, tel. (4021) 317.2126; e-mail: inst_geodin@geodin.ro
<http://www.geodin.ro/~prezentare/>



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI



Programul Operațional Sectorial Creșterea Competitivității Economice
Axa prioritară 2: Competitivitate prin Cercetare, Dezvoltare Tehnologică și Inovare
Operațiunea: O.2.1.2 „Proiecte CD de înalt nivel științific la care vor participa specialiști din străinătate”

Proiect: Infrastructură cibernetică pentru studii geodinamice relaționate cu zona seismogenă Vrancea: ID-593, cod SMIS-CSNR 12499

Etapă 2: Construirea și vizualizarea unei serii de modele geodinamice tridimensionale de înaltă rezoluție cu ajutorul sistemului HPCC/HPVC/GeoWall:

Activarea și testarea sistemului hardware HPCC și HPVC

Perioada: 18 iunie 2011-17 decembrie 2011

STUDIU

PRIVIND INSTALAREA/CONFIGURAREA/TESTAREA CODURILOR PARALELE

Director de proiect,

Dr. Vlad Constantin Manea

A U T O R I :

Dr. Vlad Constantin Manea

Dr. Marina Manea

Drd. Mihai Pomeran

CUPRINS:

1. Introducere	1
2. CitcomS-soft liber si paralelizat pentru studiul fenomenelor de convecție in mantaua terestra	2
2.1. Descriere generala	2
2.2. Griduri si geometrii	3
2.3. Instalarea pachetului CitcomS pe sistemul de calcul CyberDyn	6
2.3.1. Compilatorul C	6
2.3.2. Librariile MPI	7
2.3.3. Comenzile de compilator MPI C	7
2.3.4. Python	7
2.3.5. Procedura de instalare a CitcomS	8
2.3.6. Configurarea sistemului Batch	8
2.3.7. Exemple multiprocesor	9
2.3.8. Directoarele de iesire si formatul datelor de iesire	10
2.3.9. Launchers si Schedulers	11
2.3.10. Monitorizarea programelor CitcomS pe sistemul de calcul HPCC-Cyberdyn	12
3. Teste de randament de calcul	13
3.1. Testarea HPCC cu modele de convecție in mantaua terestra	13
3.1.1. Test de convecție termica in manta la scara regionala	13
3.1.2. Test de convecție termica in manta la scara globala	14
3.1.3. Test de convecție termochimica in manta la scara globala	15
3.2. Testarea sistemului HPCC CyberDyn si cu ajutorul unui modul de trasori	16
4. Concluzii	18
5. Referinte bibliografice	19

1. INTRODUCERE

Scopul principal al proiectului CYBERDYN este construirea unei infrastructuri cibernetice in cadrul Institutului de Geodinamica al Academiei Romane, Bucuresti, pentru studierea evolutiei geodinamice pe termen lung a zonei seismogene active Vrancea. Aceasta infrastructura cibernetica este formata dintr-un HPCC (High Performance Computing Cluster – Grup de Servere pentru Calcule de Inalta Performanta), un HPVC (High Performance Visualization Cluster – Grup de Servere pentru Vizualizare de Inalta Performanta) si un sistem de Vizualizare Stereo in 3D (GeoWall).

Noua infrastructura cibernetica va ajuta la crearea unui corp de cercetatori format din experti cu inalta pregatire obtinuti prin antrenarea tinerilor oameni de stiinta in campul geodinamicii computationale, permitand generarea primului centru de excelenta in domeniu din Romania. Activitatea acestui centru de excelenta se va extinde si dupa finalizarea ultimei etape a proiectului prin formarea tinerilor specialisti si prin participarea in proiecte nationale/internationale bazata pe capacitatea si performanta oferite de o asemenea tehnologie.

In acest studiu prezentam in detaliu instalarea si testarea de coduri numerice paralele specifice modelarii numerice in geodinamica. In particular acest studiu se concentreaza pe pachetul open-source pentru modelare numerica folosind elemente finite – CitcomS (<http://geodynamics.org/cig/software/citcoms/>). Mai jos prezentam un scurt rezumat al pachetului CitcomS, imbogatit cu informatii aditionale. In partea finala a acestui studiu prezentam rezultatele testelor de performanta rulate pe HPCC – CyberDyn. Acest lucru este necesar pentru a se putea stabili numarul optim de procesoare care poate sa fie folosit pentru realizarea modelelor numerice geodinamice specifice zonei Vrancea. Tinem sa mentionam ca decizia de a se implementa si utiliza acest software rezida in faptul ca membrii principali ai echipei de cercetare CyberDyn au o bogata experienta in utilizarea lui si in plus au participat activ la dezvoltarea acestui soft, in perioada 2004-2006, in urma unei burse postdoctorale in Laboratorul de Seismologie, Caltech (California Institute of Technology).

2. CitcomS - SOFT LIBER SI PARALELIZAT PENTRU STUDIUL FENOMENELOR DE CONVECTIE IN MANTAUA TERESTRA.

2.1. DESCRIERE GENERALA

CitcomS este un cod de elemente finite care rezolva probleme de convecție termo-chimică relate cu manta terestră, într-un sistem de coordonate sferice. Este scris în limbajul C + MPI (Message Passing Interface: www.mpich.org), și are posibilitatea să ruleze pe o multitudine de computere paralele, incluzând sisteme cu memorie distribuită sau împărțită. De asemenea, pentru a extinde funcționalitatea acestui software, ultima versiune a CitcomS lucrează coordonat cu Python (www.python.org). CitcomS a fost dezvoltat la Caltech (California Institute of Technology) sub coordonarea Prof. Dr. Mike Gurnis.

CitcomS poate să rezolve atât modele numerice pe întreaga sferă terestră, precum și în regiuni mai restrânse. Unul dintre avantajele oferite de CitcomS este acela că poate să rezolve probleme în care reconstrucția plăcilor tectonice este încorporată. Printre capabilitățile adiționale oferite de CitcomS enumerăm următoarele: folosirea de viscozități variabile, incluzând dependența de temperatură, presiune, compoziție, nivel de eforturi.

Partea centrală a codului numeric, în special pentru simulările în care timpul reprezintă o componentă importantă, este reprezentată de soluția secvențială a ecuației de mișcare și a ecuației de transport de căldură. Pentru început, o problemă de convecție în manta începe cu soluția legată de câmpul de temperatură. Apoi ecuația de moment este rezolvată, aceasta oferind un câmp de viteze. Acest câmp de viteze este utilizat ulterior pentru a rezolva ecuația de advecție-difuzie, ecuație care produce un nou câmp de temperatură. CitcomS folosește exact această schemă numerică de rezolvare a sistemului de ecuații. Datorită numărului mare de variabile, CitcomS folosește o schemă iterativă pentru a rezolva numeric câmpul de viteză și presiune. În interiorul schemei iterative, CitcomS oferă posibilitatea de să utilizeze un solver tip conjugate gradient, sau un solver multi-grid pentru a discretiza ecuațiile.

În CitcomS, manta terestră este considerată un mediu anelastic, compresibil și folosește aproximația tip TALA (Truncated Anelastic Liquid Approximation). În acest caz, convecția termică este controlată de ecuațiile de conservare de masă, moment și energie, iar formularea lor matematică este următoarea (*Tan et al., 2006*):

$$(\rho u_i)_{,i} = 0$$

$$-P_{,i} + \left(\eta(u_{i,j} + u_{j,i} - \frac{2}{3}u_{k,k}\delta_{ij}) \right)_{,i} - \delta\rho g\delta_{ir} = 0$$

$$\rho c_P (T_{,t} + u_i T_{,i}) = \rho c_P \kappa T_{,ii} + \rho \alpha g u_r T + \Phi + \rho (Q_{L,t} + u_i Q_{L,i}) + \rho H$$

in care ρ reprezinta densitatea, u viteza, P presiunea dinamica, η vascozitatea, δ_{ij} operatorul Kroneker, $\delta\rho$ anomalia de densitate, g atractia gravitationala, T temperatura, c_P capacitatea termica, κ difuzivitatea termica, α coeficientul de dilatare termica, Φ disipatia vascoasa, Q_L caldura latentă datorită schimbării de fază, și H caldura radioactivă. Expresia $X_{,y}$ reprezintă derivata lui X în raport cu variabila y , iar indicii i și j sunt indici spațiali, r în direcția radială, iar t este timpul.

2.2. GRIDURI SI GEOMETRII

Una dintre componentele specifice codurilor de elemente finite este cea a gridurilor. Există două tipuri de griduri și geometrii în CitcomS. Configurația de bază a CitcomS permite utilizarea unui grid într-un domeniu regional limitat în longitudine și latitudine. Înșă, există și opțiunea de a genera un grid în cazul în care se dorește o simulare într-un grid sferic și la scară globală. Pentru un grid regional, CitcomS utilizează un grid uniform cu posibilitatea ca acest grid să fie indeseț în anumite regiuni, în funcție de latitudine, longitudine sau rază. Acest tip de indesețire este recomandată în cazul modelelor în care este nevoie de rezoluție înaltă în centrul modelului regional. Există totuși o limitare, și anume, nu se poate indeseț gridul în cazul în care în model este incorporată o limită tectonică curbilinie și care nu este orientată nord-sud sau est-vest. În cazul gridurilor regionale, coordonata θ (sau x) reprezintă colatitudinea și este măsurată de la polul nord, coordonata ϕ (sau y) reprezintă longitudinea, iar z este raza. θ și ϕ se măsoară în radiani. În figura de mai jos este prezentat modul de organizare al gridului într-o problemă regională. Secvența de indexare a nodurilor este următoarea: se începe cu direcția z , apoi x și apoi y (Figura 1). Acest mod de indexare este util pentru a putea forma corect datele de intrare și ieșire.

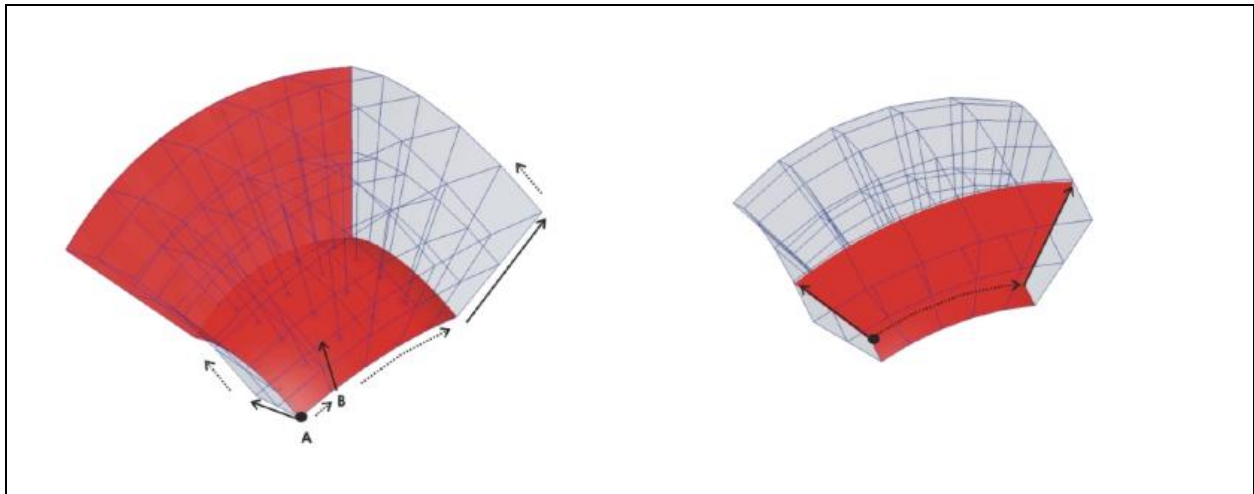


Figura 1: Indexarea nodurilor intr-un model regional. Stanga: indexarea incepe de la baza din nodul indicat prin sageata A (θ_{\min} , ϕ_{\min} , r_{inner}), si se incrementeaza incepand cu 1 de la baza in lungul directiei z. Cand se atinge partea superioara a modelului, indexarea continua de la baza in nodul indicat cu litera B. Dreapta: dupa ce s-a indexat complet un plan vertical theta-raza, indexul ϕ este incrementat cu o unitate iar indexarea continua cu (θ_{\min} , r_{inner}) asa cum s-a discutat mai sus (sursa: <http://geodynamics.org/cig/software/citcoms/>). In cazul HPCC CyberDyn care detine 1344 de nuclee de calcul se poate utiliza urmatoare configuratie maximala: $16 \times 16 \times 4 = 1024$ de nuclee folosite intr-o singura simulare numerica.

Desi in cadrul proiectului CyberDyn s-a propus folosirea de modele regionale, mai jos prezentam pe scurt si capabilitatea CitcomS de a genera modele globale. In cazul unui grid global, CitcomS ofera posibilitatea de a genera un mesh pentru un domeniu sferic in care elementele in plan orizontal au aproximativ aceeasi arie. In varianta sferica, CitcomS imparte domeniul in 12 domenii regionale indexate de la 0 la 11 (Figura 2).

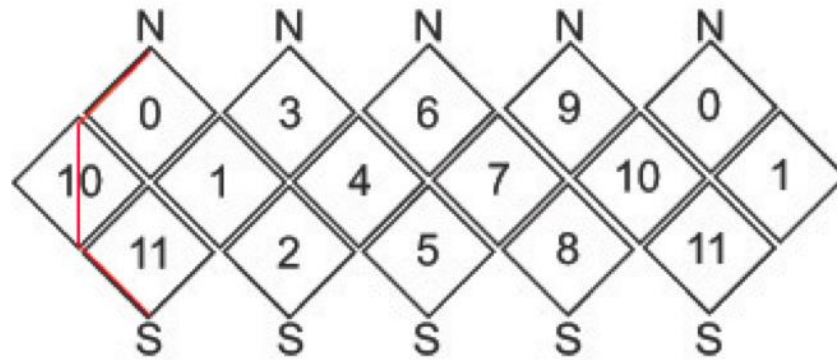


Figura 2: Conectivitatea topologica a celor 12 regiuni care impreuna, formeaza modelul sferic. N reprezinta polul nord, iar S polul sud. Linia rosie marcheaza meridianul 0 (sursa: <http://geodynamics.org/cig/software/citcoms/>).

Cele 12 regiuni sunt aproximativ patrute astfel incat laturile sa fie orientate in diagonala fata de latitudine si longitudine. Cele patru colturi sunt conectate pe cercurile majore (Figura 3). Utilizatorul trebuie sa asocieze cel puțin un procesor pentru fiecare regiune, cu alte cuvinte este nevoie de minimum 12 procesoare pentru a putea rula un model sferic CitcomS. In plus, CitcomS ofera posibilitatea de a asigna mai multe procesoare pe fiecare directie a unei regiuni, cu conditia ca acestea sa imparta de o maniera uniforma domeniile, adica sa fie uniform incarcate cu noduri si elemente (Figura 3). Acest lucru este necesar pentru a obtine o buna paralelizare, adica sa nu se incarce un procesor/memorie cu mai multa informatie (variable) fata de celelalte procesoare. In acest fel, se incearca uniformizarea timpului de executie pe procesor, stiindu-se faptul ca viteza de calcul in cazul codurilor paralele este data de cel mai lent procesor.

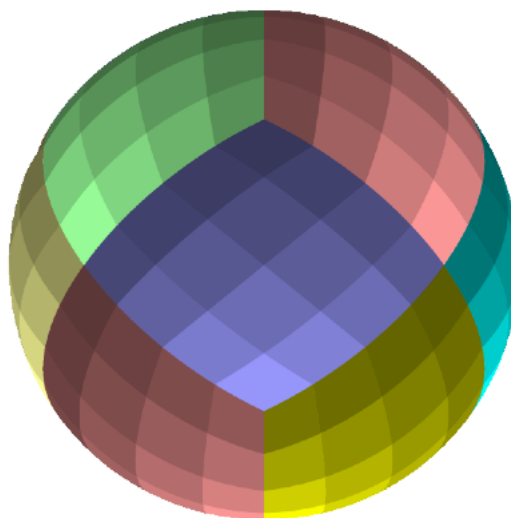


Figura 3: Proiectia ortografica a procesoarelor pentru un model CitcomS sferic care foloseste

16 procesoare pentru fiecare regiune. Fiecare dintre cele 12 regiuni care compun modelul sferic este reprezentata cu o culoare distincta. In exemplul prezentat se folosesc 2 procesoare in directie radiala, deci numarul total de procesoare pentru a putea rula un asemea model este de $12 \times 16 \times 2 = 384$ procesoare, sau nuclee de calcul (sursa: <http://geodynamics.org/cig/software/citcoms/>). In cazul HPCC CyberDyn care detine 1344 de nuclee de calcul se poate utiliza urmatoare configuratie maximala: $4 \times 4 \times 6 \times 12 = 1152$ de nuclee folosite intr-o singura simulare numerica.

2.3. INSTALAREA PACHETULUI *CitcomS* PE SISTEMUL DE CALCUL CYBERDYN

Conform manualului de folosire *CitcomS*, cerintele soft minime pentru instalarea *CitcomS* sunt urmatoarele:

- Un compilator C.
- O librerie tip MPI.
- Python 2.3 sau mai recent (Python 2.4 sau mai recent este cerut de sistemele pe 64 de biti, asa cum este cazul sistemului de calcul HPCC – CyberDyn) si fisierele header (Python.h).

Instalarea MPI este configurata de obicei pentru un anumit compilator in particular si ofera posibilitatea de a specifica un anumit compilator prin intermediul unei comezi speciale de tip wrapper. Ca atare, optiunea pentru o anumita implementare a librariilor MPI determina tipul de compilator C ce urmeaza a fi folosit.

2.3.1. COMPILATORUL C

Pe sistemele Unix sau Linux, exista o mare probabilitate ca un compilator C sa fie deja instalat. Puteti verifica acest lucru tastand urmatoarea comanda de la terminal:

```
$ cc  
cc: no input files  
$
```

Pe sistemele Linux, in cazul in care, comanda “cc” nu este gasita, atunci puteti instala GCC folosind package manager-ul pentru sistemul CentOS. Pentru GCC se poate verifica existenta instalarii acestuia prin comanda:


```
$ which gcc
/usr/bin/gcc
$
```

2.3.2. LIBRARIILE MPI

Pachetul CitcomS necesita o librerie care are implementat standardul MPI (versiunea 1 sau 2). Exista disponibile cateva implementari MPI open-source. Una dintre cele mai comune implementari este MPICH (www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich). Alte alternative ar fi: LAM/MPI (www.lam-mpi.org) sau Open MPI (www.open-mpi.org).

Instalarea MPI implica o procedura standard GNU (configure && make && make install) si trebuie facuta de catre administratorul sistemului de calcul HPCC - CyberDyn. In cazul in care nu este invocata comanda make install, atunci orice utilizator poate sa instaleze in propriul /home directory CitcomS. In plus poate sa foloseasca librariile OpenMPI care se gasesc instalate pe sistemul HPCC CyberDyn in /usr/lib64/openmpi.

2.3.3. COMENZILE DE COMPILATOR MPI C

Odata ce librariile MPI sunt instalate, utilizatorul trebuie sa verifie daca, compilatorul C se afla in calea PATH. Scriptul de configurare CitcomS cauta in mod normal urmatoarele comenzi MPI C:

```
mpicc hcc mpcc mpcc_r mpixlc cmpicc.
```

In plus ,utilizatorul trebuie sa verifice locatia mpicc:

```
$ which mpicc
/opt/open/bin/mpicc
$
```

2.3.4. PYTHON

Este foarte probabil ca interpretatorul de comenzi Python sa existe deja instalat in sistem. Pentru a verifica existenta instalarii interpretatorul de comenzi Python pe HPCC CyberDyn se poate tasta intr-un terminal urmatoarea comanda python:

```
$ python -V
Python 2.5.2
```

2.3.5. PROCEDURA DE INSTALARE A CITCOMS

Dupa ce pachetul CitcomS s-a dezarhivat, trebuie sa urmati pasii de mai jos, pentru a instala CitcomS:

1. Schimbati directorul current cu directorul in care se afla codul sursa CitcomS (folosind comanda cd)

\$ cd CitcomS-3.1.0

2. Tastati *./configure* pentru a putea configura CitcomS de accord cu setarile sistemului de calcul HPCC - CyberDyn.

\$./configure --with-pyre

Este recomandabil ca *./configure* sa fie executat cu optiunea *--with-pyre* activata pentru a se crea executabilul */bin/citcoms* care este invocat in rulajele fisierelor de configurare a modelelor numerice **.cfg*.

3. Tastati *make* pentru a compila pachetul CitcomS.

\$ make

2.3.6. CONFIGURAREA SISTEMULUI batch

Instalarea CitcomS pe sistemul de calcul HPCC – CyberDyn permite configurarea Pyre in asa fel incat comanda *citcoms* va submite automat programe spre rulare folosind sistemul de asteptare. Pyre ofera suport pentru urmatoarele sisteme batch: SGE, PBS si Globus.

Comanda pentru a submite programe catre sistemul batch depinde in general de tipul de sistem batch folosit. In cazul nostru, sistemul de calcul HPCC – CyberDyn foloseste SGE (*gridengine.org*). Daca Pyre a fost configurat corect, atunci acesta poate sa trimita automat programe citcoms catre rulare pe sistemul de calcul HPCC – CyberDyn. Acest lucru este util pentru administratia CyberDyn, in cazul in care Pyre este configurat global, in acest fel toti utilizatorii sistemului de calcul putand beneficia precum si toate aplicatiile bazate pe Pyre.

2.3.7. EXEMPLE MULTIPROCESSOR

Urmatorul exemplu de calcul foloseste un sistem de calcul HPCC cu un minim de 4 procesoare. Utilizatorul trebuie sa se afle in directorul *examples*. Modul multiprocesor de rulare al CitcomS depinde de mai multi factori, printre care enumeram: setarile hardware si software, sistemul batch, numele nodurilor de calcul precum si modul de organizare al sistemului de fisiere. In urmatoarele capitole, prezentam diferite setari ale sistemului paralel.

Exemplu de calcul: Multiprocessor, *example1.cfg*

```
[CitcomS] steps = 100
[CitcomS.controller] monitoringFrequency = 10
[CitcomS.solver] datafile = exemplu
[CitcomS.solver.mesher]
nprocx = 4
nprocy = 4
nprocz = 2
nodex = 33
nodey = 33
nodez = 17
```

In acest exemplu se folosesc doua procesoare in colatitudine (x-coordinate), 4 in longitudine (y-direction), si 2 in directia radiala (z-direction), deci in total se folosesc 32 procesoare. Additional, modelul foloseste 33 noduri in directia x (theta), 33 noduri in directia y (fi), si 17 noduri in directia z (radius_inner). Modelul ruleaza pentru 100 de pasi de timp de calcul iar fisierele de iesire sunt scrise la fiecare 10 pasi de calcul.

Este important de mentionat ca in cadrul unui script CitcomS (si in general in cazul elementelor finite, FEM) termenul “nod” se refera la nodurile de calcul care definesc colturile elementelor finite de tip “brick”, si nu la nodurile de calcul “hardware” ale sistemului HPCC CyberDyn.

Variabilele *nodex,y,z* se refera la numarul de noduri FEM intr-o anumita directie, si ca atare, fiecare procesor va avea asignat un numar de $33 \times 33 \times 17$ noduri. De precizat ca in directia x (sau y) pentru intregul domeniu de calcul sunt asignate 33 de noduri si exista un nod care este impartit intre doua procesoare. Acest nod impartit este luat in considerare pentru procesoarele specificate (1,2,4 etc.) (Figura 4). Este important de mentionat faptul ca exista o

legatura stransa intre numarul de noduri si numarul de procesoare specificate pe fiecare directie. Daca se foloseste un singur procesor, nu exista limita, utilizatorul putand sa specifice ce numar doreste. Daca se folosesc 2, 4, 8 etc. procesoare, atunci numarul de noduri trebuie sa fie impar, de genul 9, 17, 33, etc. Acest lucru este obligatoriu pentru ca fiecare procesor sa aiba acelasi numar de noduri asignat si, in plus, la frontiera dintre doua procesoare un nod trebuie impartit intre cele doua procesoare vecine (a se vedea figura 4 mai jos).

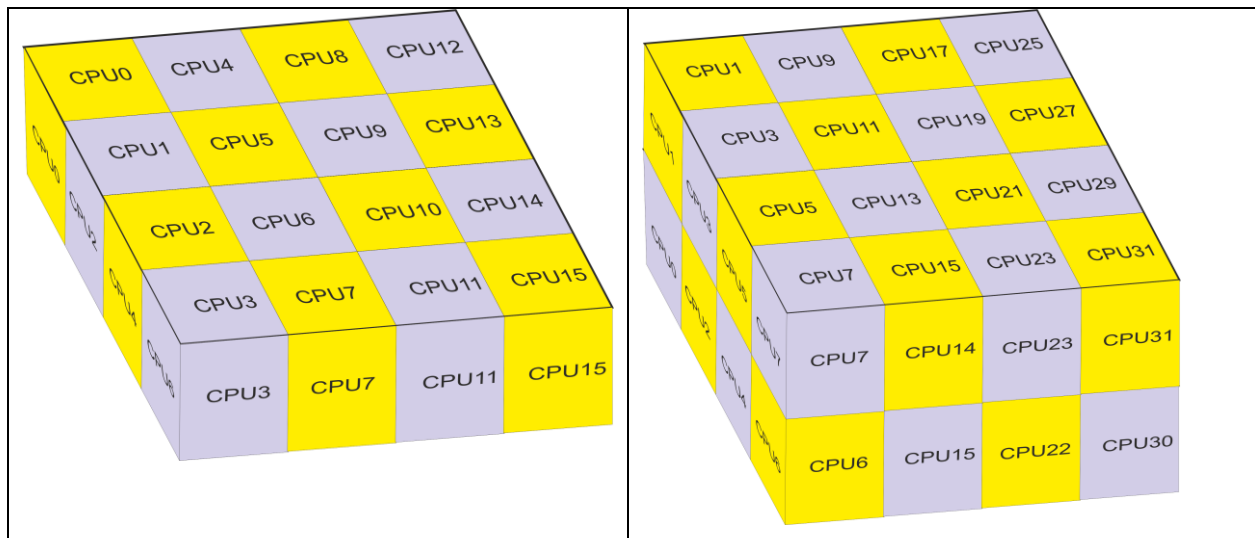


Figura 4: Vedere de sus a domeniului de calcul cu configuratia stratului de calcul superior cu procesoarele aferente: stanga 4x4x1 procesoare; dreapta 4x4x2 procesoare. A se observa ordinea de numerotare a procesoarelor: mai intai pe verticala, apoi pe co-latitudine si la sfarsit pe latitudine.

2.3.8. DIRECTOARELE DE IESIRE SI FORMATUL DATELOR DE IESIRE

CitcomS genereaza un mare numar de fisiere ASCII sau binare, ceea ce implica o buna organizare a directoarelor atunci cand se ruleaza o anumita simulare numerica. De asemenea, acest lucru este foarte util si pentru post-procesarea rezultatelor. Este important de mentionat ca modul de gestionare al acestor fisiere de iesire generate de CitcomS depinde de modul de implementare a sistemului de fisiere, daca este unul local sau unul global. Sistemul de calcul HPCC – CyberDyn foloseste un sistem de fisiere de ultima generatie si de mare viteza tip Panasas de 40 TB care este conectat printr-o conexiune 10 GB la nodurile de login. Acesta este un sistem global, in care toate nodurile de calcul pot scrie rezultatele simularilor numerice. In cazul in care fiecare nod de calcul (server) are montat local un hard disk, aceasta configuratie se

refera la un sistem de fisiere local. Alte sisteme de ultima generatie folosesc un sistem de fisiere paralel (de ex., NFS, GPFS, PVFS), sistem care este montat pe toate nodurile de calcul ale unui sistem HPCC. In mod normal, directorul home este montat pe un sistem de fisiere in paralel. Sistemul de fisiere local este un sistem care este doar mai ieftin, dar nu la fel de performant ca un sistem paralel de ultima generatie.

2.3.9. LAUNCHERS SI SCHEDULERS

In cazul in care ati folosit MPI, *mpirun* are nevoie de cateva optiuni tip command-line pentru a putea lansa programe in paralel. CitcomS prin intermediul Pyre ofera o mare flexibilitate si usurinta pentru a submite programele in paralel.

Utilizarea sistemului batch. Setarile necesare submiterii in paralel a unui program CitcomS sunt specificate in exemplul de mai jos.

[CitcomS]

scheduler = lsf; tipul de sistem batch instalat pe CyberDyn

[CitcomS.lsf]

bsub-options = [-a mpich_gm]; optiune speciala pt. 'bsub'

[CitcomS.launcher]

command = mpirun.lsf; 'mpirun' comanda pt. rulare pe CyberDyn

[CitcomS.job]

queue = normal;

*walltime = 50*minute;* timpul limita de rulaj

Aceste setari se gasesc in fisierul situat la urmatoarea adresa (in directorul personal al fiecarui utilizator al sistemului de calcul HPCC – CyberDyn) *~/pyre/CitcomS/CitcomS.cfg*. Aceste setari predeterminate pot fi rescrise de la linia de comanda, unde utilizatorul poate sa specifice numele programului precum si timpul de rulaj:

```
$ citcoms example1.cfg --job.queue=debug \ --job.name=example1 --job.walltime=50*minute
```

Numarul de noduri de calcul (servere) dedicate pentru rulajul unui asemenea program este determinat automat in functie de parametrii introdusi.

2.3.10. MONITORIZAREA PROGRAMELOR CITCOMS PE SISTEMUL DE CALCUL HPCC - CYBERDYN

Odata lansat, programul CitcomS scrie in fisierul de iesire *stderr.txt* o serie de informatii utile pentru monitorizarea programului. Exista si un logfile in care aceste informatii sunt scrise, de exemplu fisierul *example1.log*. Acest fisier contine informatii utile despre convergenta solutiei numerice, sau alte informatii utile in cazul in care apar anumite erori (Figura 5):

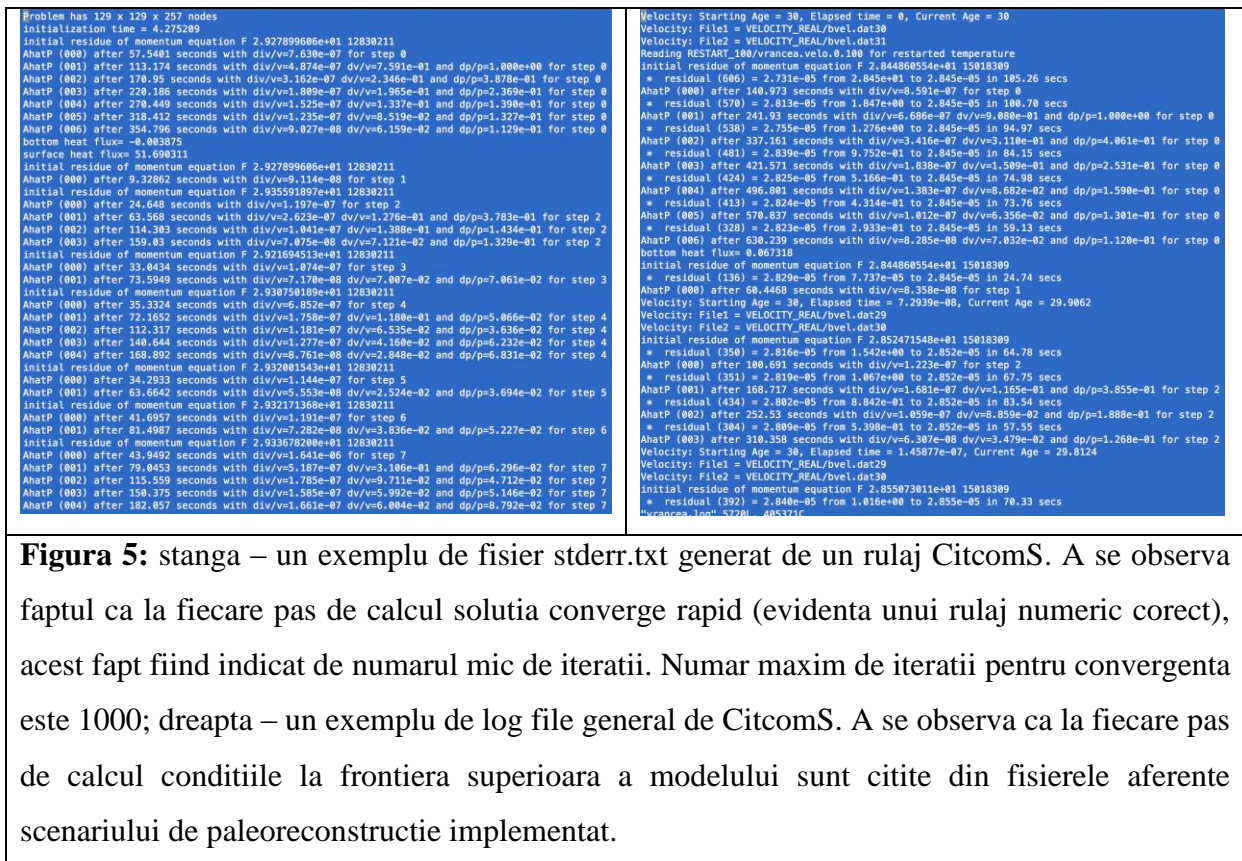


Figura 5: stanga – un exemplu de fisier *stderr.txt* generat de un rulaj CitcomS. A se observa faptul ca la fiecare pas de calcul solutia converge rapid (evidenta unui rulaj numeric corect), acest fapt fiind indicat de numarul mic de iteratii. Numar maxim de iteratii pentru convergenta este 1000; dreapta – un exemplu de log file general de CitcomS. A se observa ca la fiecare pas de calcul conditiile la frontiera superioara a modelului sunt citite din fisierele aferente scenariului de paleoreconstructie implementat.

3. TESTE DE RANDAMENT DE CALCUL

Pentru a măsura randamentul de calcul al sistemului de calcul HPCC – CyberDyn, am considerat câteva probleme de modelare numerică întâlnite în geodinamică. Este vorba despre următoarele modele:

- un test de convecție termică în manta la scara regională.
- un test de convecție termică în manta la scara globală.
- și un test de convecție termo-chimică în manta la scara globală.

Adițional, am testat sistemul HPCC CyberDyn și cu ajutorul unui cod de trasori paralelizat dezvoltat în cadrul proiectului CyberDyn de către membrii echipei de cercetare, cod care va fi utilizat ulterior pentru studiul diverselor scenarii tectonice aferente zonei Vrancea (de ex. *Sperner et al., 1999*).

3.1. TESTAREA HPCC CU MODELE DE CONVECȚIE ÎN MANTAUĂ TERESTRĂ

3.1.1. TEST DE CONVECȚIE TERMICĂ ÎN MANTA LA SCARA REGIONALĂ.

Toate testele sunt realizate în domeniul sferic. Pentru modelul regional, care are dimensiunile de 1 radian x 1 radian x $0.45 \cdot r$ (unde r este raza terestră), s-au folosit cinci grăduri cu rezoluție din ce în ce mai bună și anume: $17 \times 17 \times 9$, $33 \times 33 \times 17$, $65 \times 65 \times 33$, $129 \times 129 \times 65$ și $256 \times 256 \times 129$. Fiecare simulare a durat 100 de pași de calcul numeric, și s-au folosit între 4 și 1024 nuclee de calcul pentru o singură simulare. În figura 6 sunt prezentate rezultatele simulării numerice. După cum se poate observa, durata de rulare a modelului depinde atât de numărul de procesoare utilizate precum și de rezoluția utilizată. S-a observat că pentru rezoluții mici, durata de rulare crește odată cu creșterea numărului de procesoare. Acest lucru se datorează faptului că se pierde mult timp pentru comunicare între procesoare. Cu toate acestea, măritând rezoluția modelelor s-a observat o scădere continuă a timpului de calcul, de la peste 10,000 de minute când se folosesc numai 4 nuclee, la numai ~200 de minute când se folosesc 1024 de nuclee (Figura 6).

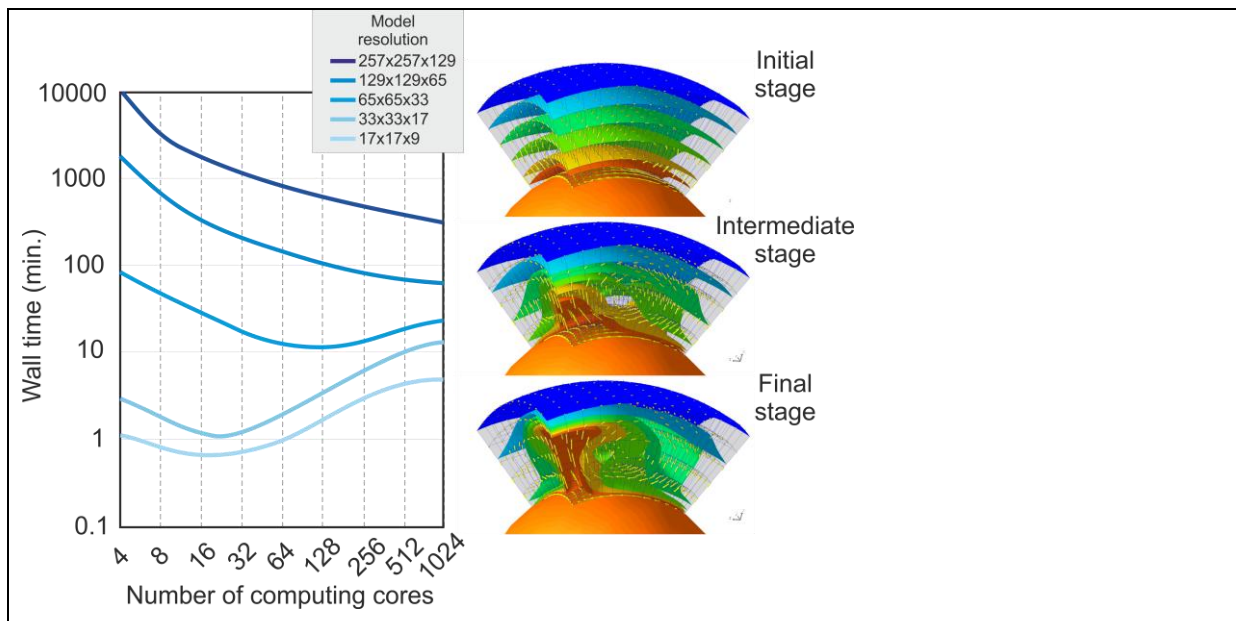


Figura 6. Rezultatele testului pentru simularea convecției termice în mantaua terestră. Se poate vedea influența mărimii gridului cât și a unui număr crescător de procesoare. În colțul din dreapta sus se poate vedea rezultatul simulării numerice (vizualizarea s-a făcut cu ajutorul pachetului open-source OpenDX: www.opendx.org).

3.1.2. TEST DE CONVECȚIE TERMICĂ ÎN MANTA LA SCARA GLOBALĂ.

Următorul test, din punct de vedere al efectuării, este similar cu cel prezentat mai sus, cu diferența că în acest caz, simularea numerică este efectuată la scară globală. Pentru acest model s-au folosit cinci griduri cu rezoluție din ce în ce mai bună și anume: $12 \times (9 \times 9 \times 9)$, $12 \times (17 \times 17 \times 17)$, $12 \times (33 \times 33 \times 33)$, $12 \times (65 \times 65 \times 65)$ și $12 \times (129 \times 129 \times 129)$. Fiecare simulare a durat 100 de pași de calcul numeric, și s-au folosit între 12 și 768 nuclee de calcul pentru o singură simulare. În figura 7 prezentăm rezultatele acestui test. Această notație se referă la: “12” reprezintă numărul de elemente regionale care împreună compun modelul sferic; secvența de trei numere (de exemplu $9 \times 9 \times 9$) reprezintă numărul de noduri de grid în direcția latitudinii, longitudinii și radiale (sau adâncime). Similar cu modelul precedent, s-a observat că pentru rezoluții mici durata de rulare crește odată cu creșterea numărului de procesoare. Acest lucru se datorează faptului că se pierde mult timp pentru comunicarea între procesoarele aflate în diverse noduri de calcul. Cu toate acestea, mărinț rezoluția modelelor s-a observat o scădere continuă a timpului de calcul, de la peste 50,000 de minute când se folosesc numai 12 nuclee, la numai ~1000 de minute când se folosesc 768 de nuclee (Figura 7).

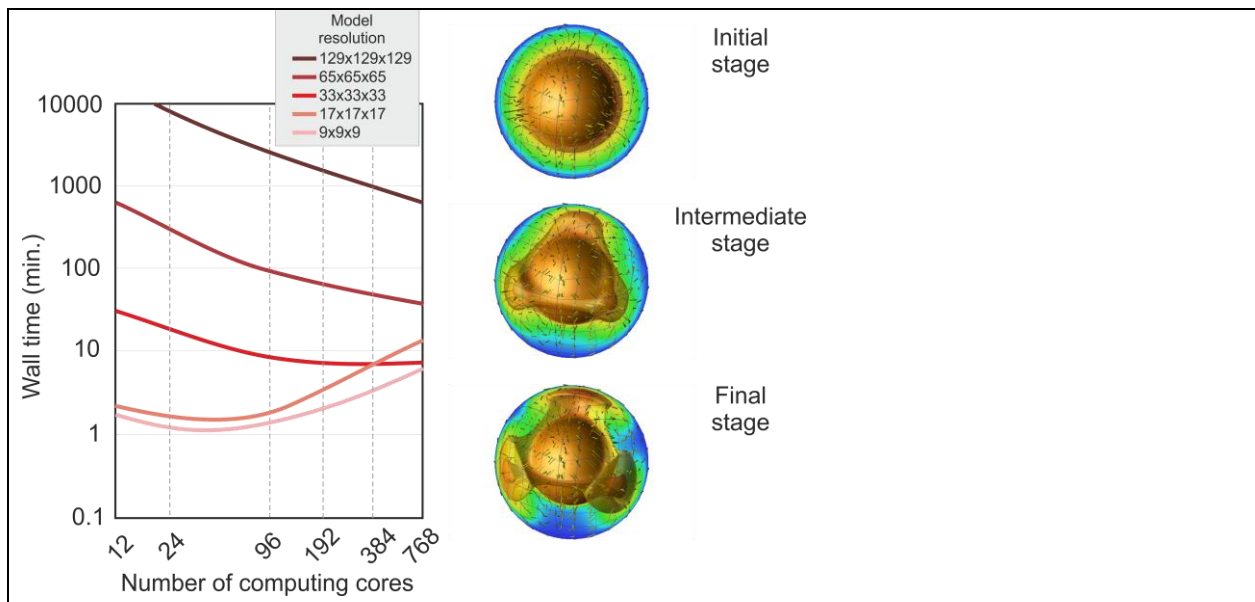


Figura 7. Rezultatele testului pentru simularea de convecție termică în mantaua terestră la scară globală. Se poate vedea influența mărимii gridului cât și a unui număr crescător de procesoare. În colțul din dreapta sus se poate vedea rezultatul simulării numerice (vizualizarea s-a făcut cu ajutorul pachetului open-source OpenDX: www.opendx.org).

3.1.3. TEST DE CONVECȚIE TERMOCHIMICĂ ÎN MANTĂ LA SCARĂ GLOBALĂ.

Ultimul test, din punctul de vedere al efectuării este similar cu cel prezentat mai sus, cu diferența că în acest caz simularea numerică este mult mai complexă, și anume o să simulăm o convecție termo-chimică în mantaua terestră. În acest caz, convecția este determinată atât de anomalia termică cât și de cea chimică. În figura 8 prezentăm rezultatele acestui test. În comparație cu testul precedent timpul de rulaj s-a mărit considerabil. Acest lucru se întâmplă deoarece în convecția termochimică se folosesc peste 60 de milioane de trasori care sunt utilizați pentru a putea simula schimbările chimice din interiorul mantalei terestre. În același timp se poate observa forma mai complicată a convecției în comparație cu cazul simplu al convecției pur termice. Ca și înainte, și în acest caz se poate observa mărirea timpului de rulaj odată cu mărirea rezoluției gridului, și o scădere a timpului de rulaj odată cu incrementarea numărului de procesoare.

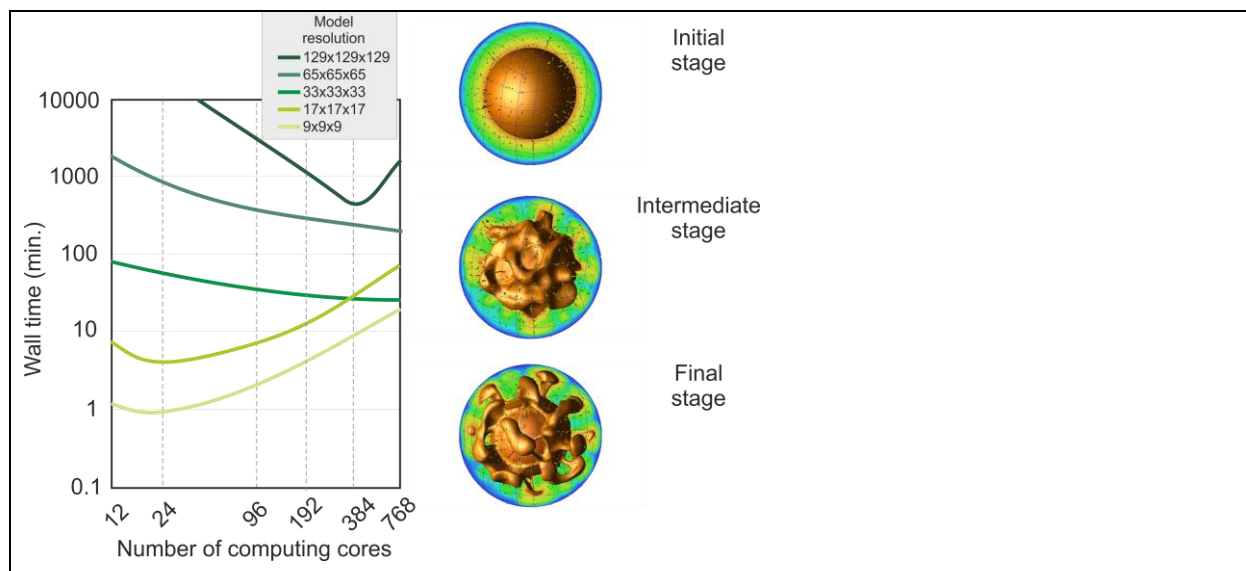


Figura 8. Rezultatele testului convecției termochimice în mantaua terestră. Se poate vedea influența atât a mării gridului cât și a numărului crescător de procesoare. În colțul din dreapta sus se poate vedea rezultatul simulării numerice (vizualizarea s-a făcut cu ajutorul pachetului open-source OpenDX: www.opendx.org).

3.2. TESTAREA SISTEMUL HPCC CYBERDYN SI CU AJUTORUL UNUI MODUL DE TRASORI.

Pentru implementarea scenariilor de paleoreconstrucție aferente zonei Vrancea, cercetătorii echipei CyberDyn au dezvoltat un modul paralelizat de trasori. Acești trasori sunt folosiți la urmărirea convecției în mantaua terestră. Numărul de trasori poate să fie variabil, de la câteva mii la câteva milioane. În plus, aceștia pot să fie împărțiți pe familii, sau categorii, astfel încât să se poată identifica evoluția dinamică a diverselor zone din manta în același timp. Acest cod este legat de codul sursă CitcomS, folosind ca sursă principală câmpul de viteze. Pentru a testa HPCC CyberDyn, s-au realizat o serie de modele care au un număr crescător de trasori, de la 10,000 la 10,000,000. Rezultatele testelor sunt prezentate în figura 9. După cum se poate observa, folosirea unui număr de trasori de până la 1,000,000 nu afectează serios timpul de rulaj. Însa atunci când se folosesc mai mult de 10,000,000 de trasori pentru o singură simulare numerică, timpul de calcul se mărește mult. Acest lucru se datorează probabil faptului că fișierele de trasori de intrare și ieșire sunt pe moment în format ASCII, acestea având ca atare mărimi foarte mari în cazul în care se folosesc mulți trasori. În viitorul apropiat se prevede adaptarea codului de trasori astfel încât să utilizeze fișiere în format binar.

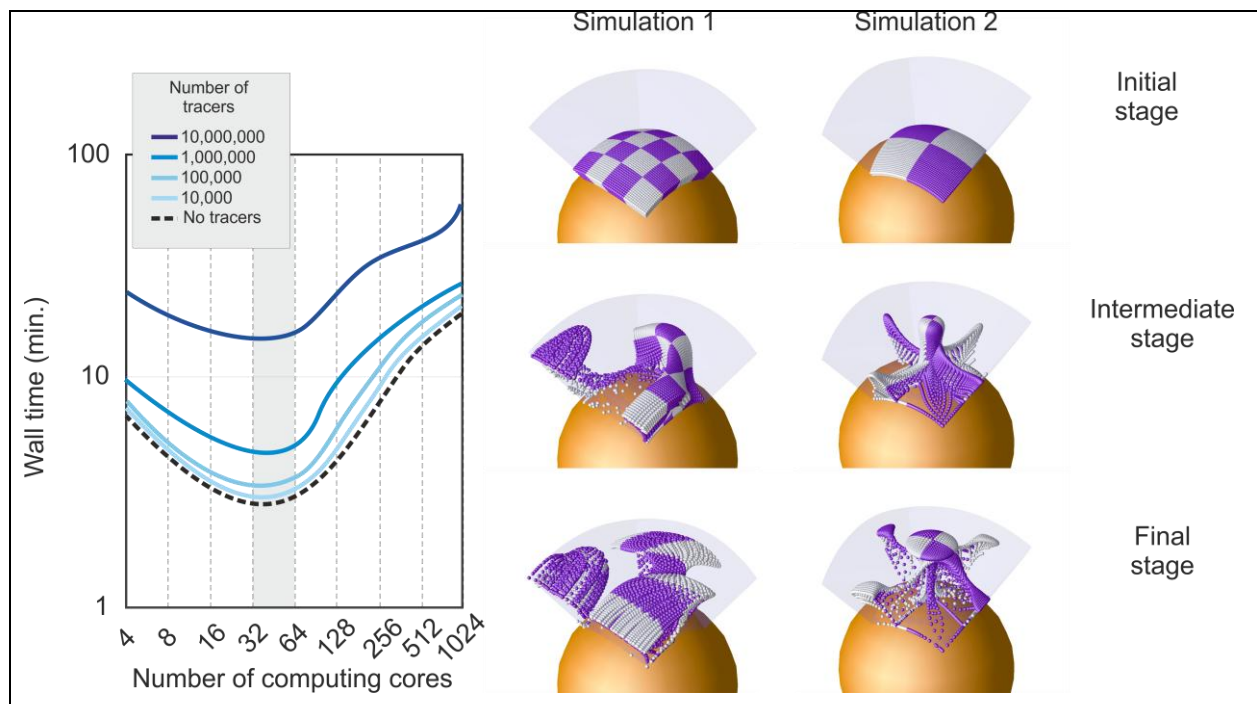


Figura 9. Rezultatele unui test de convecție cu trasori în mantaua terestră la scara regională. Se poate vedea atât influența numărului de trasori cât și a numărului crescător de procesoare. În dreapta sus, se pot vedea rezultatele a două simulări numerice (vizualizarea s-a făcut cu ajutorul pachetului open-source OpenDX: www.opendx.org).

4. CONCLUZII

In urma studiului privind instalarea/configurarea/testarea codurilor paralele pe sistemul HPCC CyberDyn s-au tras urmatoarele concluzii principale:

- s-a reusit cu succes instalarea si configurarea soft-ului liber CitcomS astfel incat sa poata sa foloseasca resursele disponibile pe HPCC CyberDyn (in paralel prin utilizarea librariilor MPI).

- additional, s-a reusit configurarea CitcomS astfel incat sa poata sa foloseasca administratorul de rulaje SGE.

- testarea CitcomS pe HPCC CyberDyn s-a facut folosind o serie de modele de convecție in manta, cu diverse rezolutii si folosind intre 4 (respectiv 12) si 1024 (respectiv 768) nuclee pentru o singura simulare numerica.

- s-a observat ca pentru rezolutii mici durata de rulare creste odata cu cresterea numarului de procesoare. Acest lucru se datoraza faptului ca se pierde mult timp pentru comunicare intre procesoarele aflate in diverse noduri de calcul (servere).

- marind rezolutia modelelor s-a observat o scadere continua a timpului de calcul, de la peste 10,000 (respectiv 50,000) de minute cand se folosesc numai 4 (respectiv 12) nuclee, la numai 200 (respectiv 1000) de minute cand se folosesc 1024 (768) de nuclee.

- additional, s-a testat sistemul HPCC CyberDyn si cu ajutorul unui cod de trasori paralelizat, si s-a observat ca se pot folosi pana la 1,000,000 de trasori intr-o singura simulare numerica fara penalizari semnificative de timp de rulaj.

5. REFERINTE BIBLIOGRAFICE

-CitcomS: <http://geodynamics.org/cig/software/citcoms/>

-Message Passing Interface: www.mpich.org

-Python: www.python.org

-Tan, E., Choi, E., Thoutireddy, P., Gurnis, M., Aivazis, M., 2006. GeoFramework: coupling multiple models of mantle convection within a computational framework. *Geochem. Geophys. Geosyst.* 7. doi:10.1029/2005GC001155 Q06001, 14 pp.

-MPICH: www.unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich

-LAM/MPI: www.lam-mpi.org

-Open MPI: www.open-mpi.org

-Sperner, B., Ratschbacher, L., Zweigel, P. et al., 1999. Lateral extrusion, slab-break-off and subduction retreat: the Oligocene-Recent collision-subduction transition in the Alps and Carpathians. In: *Penrose Conference: Subduction to Strike-Slip Transitions on Plate Boundaries*, 18±24 January 1999, Puerto Plata, Dominican Republic, pp. 103±104.

-OpenDX: www.opendx.org

-Sun Grid Engine: <http://gridengine.sunsource.net>