

## Raport stiintific

privind implementarea proiectului in perioada ianuarie – decembrie 2012

Titlu proiect : *Kinetic models for micro-scale transport phenomena and structure formation in complex fluids: implementation on GPU-based parallel computing systems*

Cod proiect : PN-II-ID-PCE-2011-3-0516

Activitatile desfasurate in cursul anului 2012 la acest proiect au urmarit realizarea Obiectivului O II, intitulat **“Build up of a GPU-based computing system and implementation of LB models on this many-core system using the CUDA library”**, cu doua etape.

In prima etapa O II-1 (ianuarie - iunie 2012), intitulata **“Set up of GPU computing system”**, a fost achizitionat prin licitatie publica un sistem de calcul (echipament de procesare date) multicore dotat cu 2 procesoare Quad-core, 48 GB memorie RAM si 4 (patru) placi grafice (GPU = Graphics Processing Units) nVIDIA Tesla Fermi M2090. Fiecare placa grafica a acestui system poseda 512 cores (nuclee de procesare) si o memorie interna de 6 GB. Conform specificatiei tehnice a producatorului (NVIDIA Corporation, SUA), fiecare placa GPU M2090 are o performanta maxima de 665 Gigaflops in dubla precizie si 1331 Gigaflops in simpla precizie. Echipamentul este prezentat in Figura 1, iar in Figura 2 se vad cele 4 placi grafice (GPU).

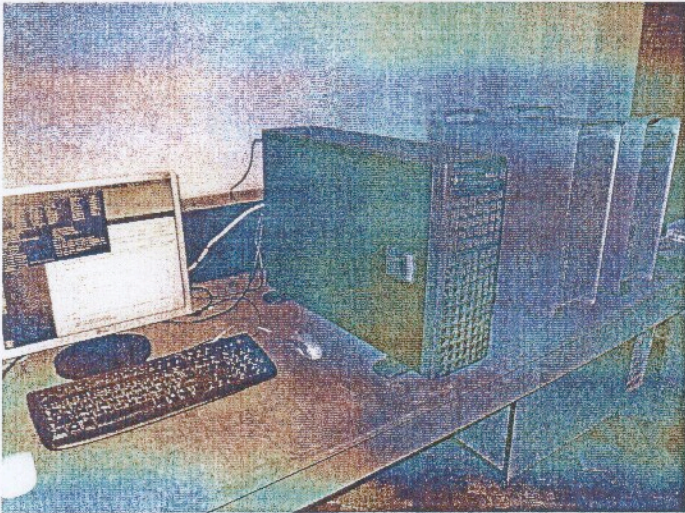


Figura 1.

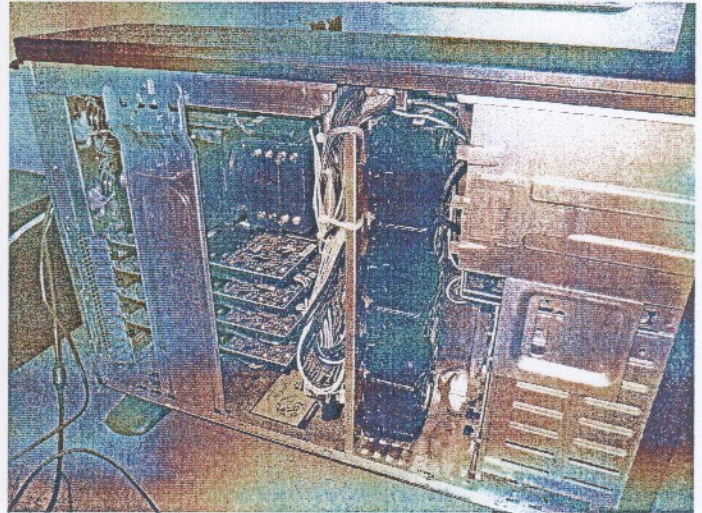


Figura 2.

Dupa mai multe teste in care s-a urmarit comportarea acestui echipament cu diferite sisteme de operare din familia Unix (FreeBSD 8.3, OpenSUSE 12.1, etc) s-a optat pentru sistemul de operare Ubuntu 12.04, care a permis instalarea si configurarea fara probleme de compatibilitate a bibliotecii CUDA pentru programarea aplicatiilor stiintifice pe placi grafice GPU produse de NVIDIA, precum si a driver-ului corespunzator pentru placa Fermi M2090. Suplimentar, pe acest echipament a fost instalata si biblioteca PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation), elaborata la Argonne National Laboratory (Argonne, Illinois), biblioteca utilizata in mod curent de catre membrii echipei de cercetare pentru dez-

voltarea algoritmilor de calcul, si care asigura portabilitatea programelor pe sisteme foarte mari, inclusiv pe sistemul IBM Blue Gene / P de la Universitatea de Vest din Timisoara.

In etapa O II-2 (iulie – decembrie 2012), intitulata “**Elaboration of specific codes for the GPU system and their optimization**”, au fost elaborate la inceput cateva programe simple pentru placile GPU, pentru a permite membrilor echipei familiarizarea cu programarea acestora utilizand biblioteca CUDA. In perioada octombrie-noiembrie 2012 a fost elaborat o prima versiune a unui program Lattice Boltzmann pentru modelarea sistemelor lichid-vapori utilizand procesoarele grafice GPU. Acest program este in curs de optimizare si va fi utilizat intensiv in cadrul obiectivului O III al proiectului, prevazut pentru anul 2013.

Pe langa activitatea de programare/implementare a modelelor Lattice Boltzmann pe echipamentul de calcul multicore (GPU), activitatile desfasurate in cadrul obiectivului O II-2 au cuprins dezvoltarea unor noi familii de modele Lattice Boltzmann bazate pe cuadratura Gauss-Laguerre in spatial impulsurilor, precum si implementarea/testarea (inclusiv pe sistemul IBM Blue Gene / P) a unor modele lattice Boltzmann de tip Gauss-Hermite, imbunatatite prin utilizarea unor scheme numerice de tip CTU (Corner Transport Upwind, cu sau fara limitator de flux). Prin dezvoltarea acestor noi modele s-a urmarit imbunatatirea stabilitatii numerice si a preciziei rezultatelor, comparativ cu celelalte modele si scheme existente in literatura. Modelele lattice Boltzmann bazate pe cuadratura Gauss-Laguerre constituie rezultate originale ale echipei de cercetare, fiind prezentate de catre directorul de proiect in cursul anului 2012 la 2 conferinte internationale:

1. B.Piaud, S. Blanco, R. Fournier, V.E. Ambrus, V. Sofonea

Gauss quadratures – the keystone of Lattice Boltzmann models

21<sup>st</sup> International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics, 23 – 27 July, 2012,

Bangalore (India)

<http://indiabusinessonline.com/dsfd/>

2. V. Sofonea, V.E. Ambrus

Diffuse Reflection Boundary Conditions and Lattice Boltzmann Models for Microfluidics

CECAM Worksho Fluid-Structure Interactions in Soft-Matter Systems: From the Mesoscale

to the Macroscale, 26 – 30 November 2012, Prato (Italia)

<http://www.cecarn.org/workshop-656.html>

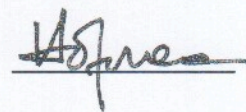
si constituie obiectul a trei lucrari stiintifice (dintre care una a fost deja trimisa spre publicare la International Journal of Modern Physics, iar alte doua sunt in faza de redactare, urmand a fi trimise spre publicare la inceputul anului 2013.

Mentionam totodata ca o parte din rezultatele obtinute in acest an vor fi cuprinse si in lucrarile de dizertatie a unor membri ai echipei de cercetare, care urmeaza a fi sustinute in anul 2013: ing. Adrian Horga, masterand la Facultatea de Automatica si Calculatoare a Universitatii Politehnica Timisoara

(implementarea si optimizarea pe sisteme GPU a unor modele Lattice Boltzmann) si fiz. Tonino Biciusca, masterand la Facultatea de Fizica a Universitatii de Vest din Timisoara (studiul dinamicii procesului de separare a fazelor in sisteme lichid-vapori utiliznd modele Lattice Boltzmann si functionalele Minkowski). Totodata, dl. fiz. Tonino Biciusca a participat cu o lucrare poster la Conferinta de Fizica TIM 12, organizata la Timisoara in perioada 27-30 Noiembrie 2012 (titlul lucrarii: Lattice Boltzmann simulation of liquid-vapour systems).

Director proiect,

Dr. fiz. Victor Sofonea

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'V. Sofonea', is written over a horizontal line.