

PRACE Bilgi Günü

Doç. Dr. Ayşe Gül Güngör

İstanbul Teknik Üniversitesi Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi

17. 01. 2022

EU Prace Projeleri

PRACE Project Access (Tier-0)

- **Call 18** AFTBL – Direct numerical simulation of adverse and favorable pressure gradient turbulent boundary layer, 2018, **Yürütücü (İTÜ)**
 - 66 400 000 core hours on MARCONI (KNL) hosted by CINECA, Italy
- **Call 17** AFTBL – Direct numerical simulation of adverse and favorable pressure gradient turbulent boundary layer, 2017
- **Call 9** Direct numerical simulation of equilibrium adverse pressure gradient turbulent boundary layers, 2014, **Araştırmacı (İTÜ)**
 - 17 040 000 core hours on SuperMUC hosted by GCS at LRZ, Germany
- **Call 1** Entrainment effects in rough wall boundary layers, 2010, **Araştırmacı (İspanya)**
 - 40 000 000 core hours on JUGENE hosted by GCS at FZJ, Germany

PRACE Preparatory Access

- Direct numerical simulation of adverse pressure gradient boundary layer control, 2014, 2017, **Yürütücü (İTÜ)**

PRACE DECI Access

- **DECI- 14** Direct numerical simulation of non-equilibrium adverse pressure gradient turbulent boundary layers, 2017, **Yürütücü (İTÜ)**
- **DECI - 12** Simulation of adverse pressure gradient turbulent boundary layers, 2014 **Yürütücü (İTÜ)**

AFTBL

1st Tier-0 project in Turkey

Direct Numerical Simulation of Adverse and Favorable Pressure Gradient
Turbulent Boundary Layers



VARTACO – Highly turbulent Taylor-Couette flow with spanwise varying wall roughness

Project Title: VARTACO – Highly turbulent Taylor-Couette flow with spanwise varying wall roughness

Project Leader: Dr Jonathan Gula

Resource Awarded: 30 million core hours on MareNostrum

▼ Details

SURFER – SURFactant-laden droplets in turbulence

Project Title: SURFER – SURFactant-laden droplets in turbulence

Project Leader: Prof. Alfredo Soldati

Resource Awarded: 30 million core hours on Marconi – KNL

▼ Details

CEWAF – Curvature effects in wall-bounded flows

Project Title: CEWAF – Curvature effects in wall-bounded flows

Project Leader: Dr. Geert Brethouwer

Resource Awarded: 30 million core hours on JUWELS

▼ Details

AFTBL – Direct Numerical Simulation of Adverse and Favorable Pressure Gradient Turbulent Boundary Layers

Project Title: AFTBL – Direct Numerical Simulation of Adverse and Favorable Pressure Gradient Turbulent Boundary Layers

Project Leader: Assoc. Prof Ayse Gungor

Resource Awarded: 66.4 million core hours on Marconi – KNL

▼ Details

MOST-SEA The mechanics of sediment transport under sea waves

Project Title: MOST-SEA The mechanics of sediment transport under sea waves

Project Leader: Prof. Giovanna Vittori

Resource Awarded: 30 million core hours on Marconi – KNL

▼ Details

18th Project Access Call – Awarded Projects

Sunday 31 March 2019

Engineering(5)

Fundamental Constituents of Matter (10)

Mathematics and Computer Sciences (1)

Biochemistry, Bioinformatics and Life sciences (8)

Earth System Sciences (4)

Chemical Sciences and Materials (10)

Universe Sciences (4)

Biochemistry, Bioinformatics and Life sciences (8)

66.4 Million Core Hours

AFTBL

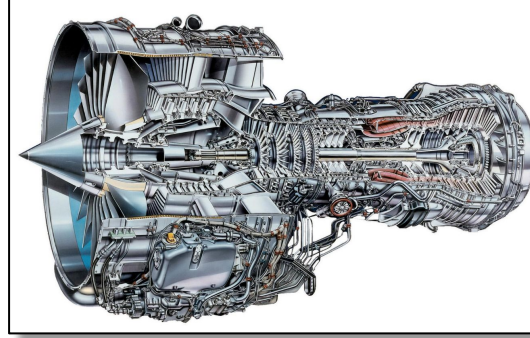
1st Tier-0 project in Turkey

Direct Numerical Simulation of Adverse
and Favorable Pressure Gradient

Turbulent Boundary Layers

Türbülanslı akışlar pek çok önemli mühendislik uygulamalarında görülür

Turbomakinalar



Uçak Kanatları



Rüzgar Türbinleri



- Dünya atmosferindeki sınır tabaka,
- çoğu yanma süreci,
- gemilerin, arabaların, denizaltıların ve uçakların izleri... **türbülanslıdır!**

AFTBL

Key societal / technological contribution

Türbülanslı akışların kontrolü hem **enerji verimliliği** hem de **emisyonlar (karbon ayak izi)** açısından büyük önem taşımaktadır.

- Boru ve kanallarda **akışkanın taşınması**,
- Araba, gemi veya uçak gibi araçları hava veya su gibi akışkanlar içerisinde **hareket ettirilmesi** için gereken enerjinin yarısı “**türbülans**” nedeniyle kaybedilmektedir.

Enerji ve Tabii Kaynaklar Bakanlığı 2018 yılı verilerine göre

- Türkiye'deki enerjinin % 28.5'i **ulaşım** için harcanıyor

Türkiye İstatistik Kurumu 2021 yılı raporuna göre

- Türkiye'de 2019 yılında 506 milyon ton CO₂ salınımı yapıldı.
- Bunun yüzde 16'sı **ulaşımdan** kaynaklı

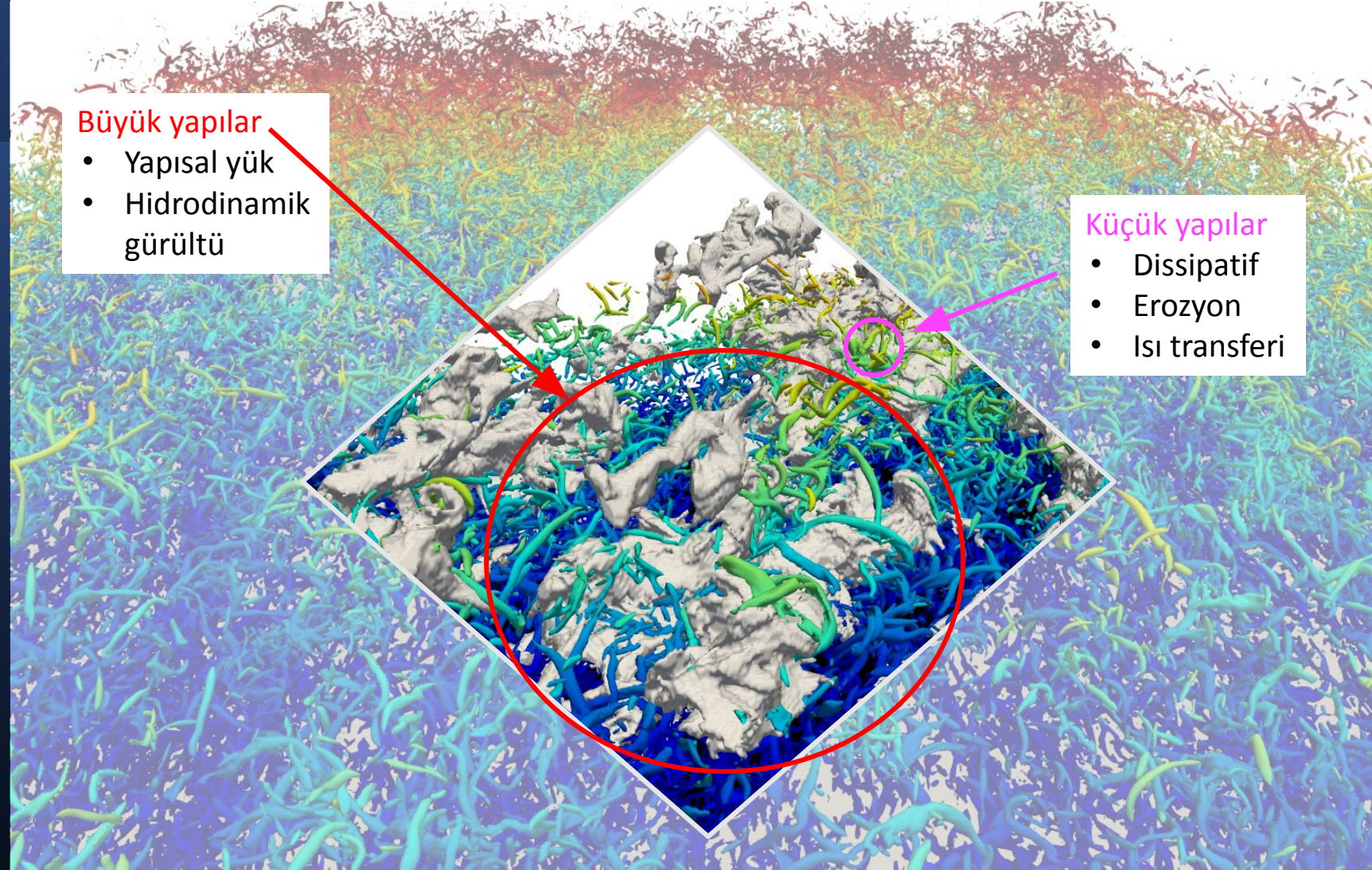
*“The outcomes of this study could also contribute to the design of more effective methods of **controlling** drag and separation in order to **improve** the aerodynamic performance of machines. Hence, it will lead to **more efficient** and **cleaner** power generation, a **reduction** in **fuel consumption**, and **minimization** of CO₂ emissions....”*

Neden 66.4 milyon çekirdek saate ihtiyacımız var?

Türbülans zamanda ve uzayda çok-ölçekli (multi-scale) bir problem!

AFTBL

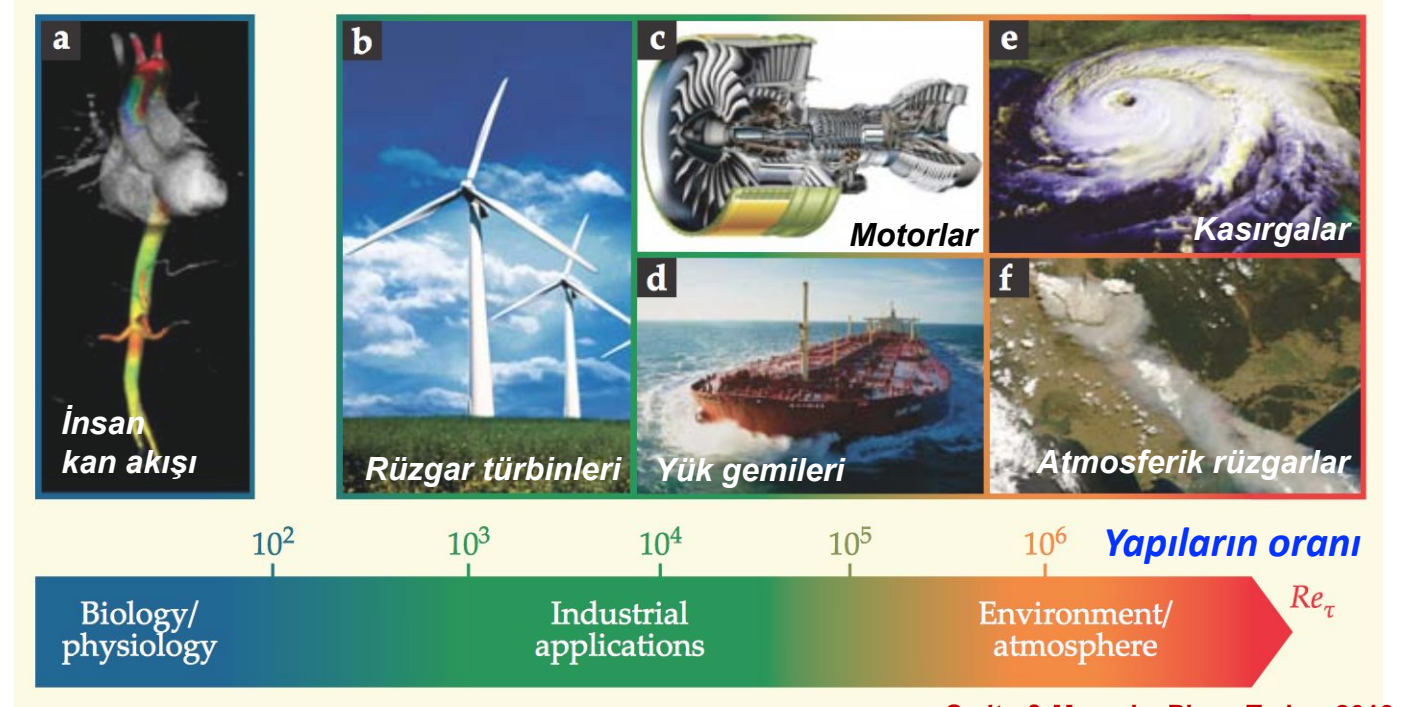
Justification of the requested resources



Neden 66.4 milyon çekirdek saate ihtiyacımız var?

Türbülans zamanda ve uzayda çok-ölçekli (multi-scale) bir problem!

Yapıların oranı **Reynolds sayısı** ile orantılı!



Smits & Marusic, Phys. Today, 2013

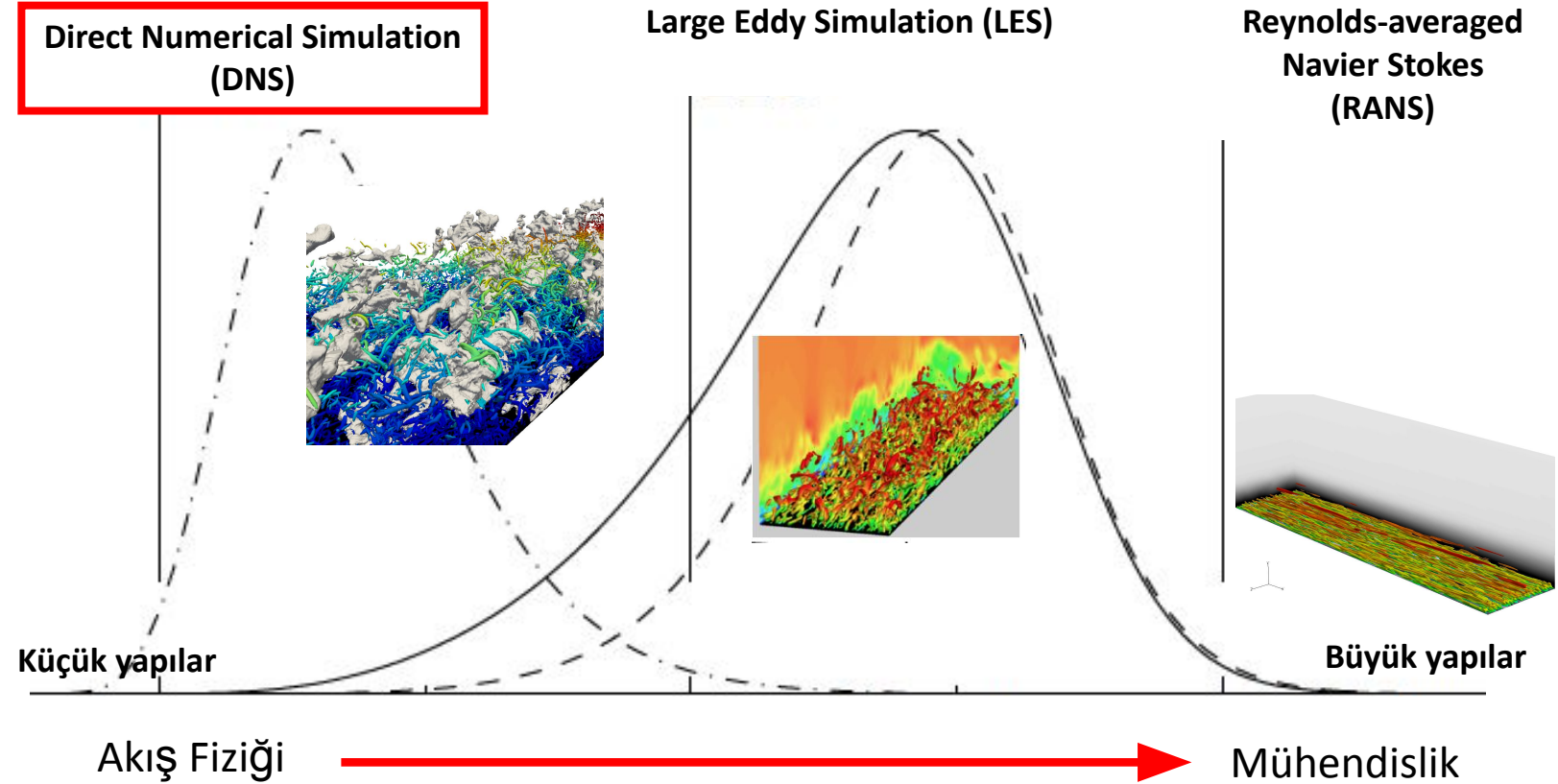
AFTBL

Justification of the requested resources

Türbülanslı Akışların Sayısal Benzetimi

AFTBL

Computational Method



*“DNS has been chosen for the computational method, because none of the existing velocity and pressure measurement methods can provide **accurate information** everywhere in a flow (especially very close to the wall) in three-dimensional **space** and in **time** and the only method that can provide such information is **DNS**...”*

AFTBL

Justification of the requested resources

Direk Sayısal Benzetim (DNS)

DNS için hesaplama maliyeti: $N_x N_y N_z \times N_t \sim Re^3$

	Çözünürlük	Grid Sayısı	Reynolds sayısı
DNS2016 (Gungor et al. 2016)	1921x191x768	0.3×10^6	4500
DNS2020 (Gungor et al. 2020)	$4609 \times 736 \times 1920$	6.5×10^9	8500
Prace Projesi	12801 x 770 x 2700	2.5×10^{10}	12000

Table 1. Justification of amount of resources requested.

Task Number	Run type	Number of runs	# Steps/Run	Walltime per step (sec)	#CPUcores (nodes)	Total core hours per run type
2	Initial run	1	150,000 (3 FTT)	20.16	4096	3.6 million core hours
3	Case #1	1	700,000 (12 FTT)	20.16	4096	17.2 million core hours
4	Case #2	1	650,000 (12 FTT)	16.80	4096	12.4 million core hours
					TOTAL	33.2 million core hours

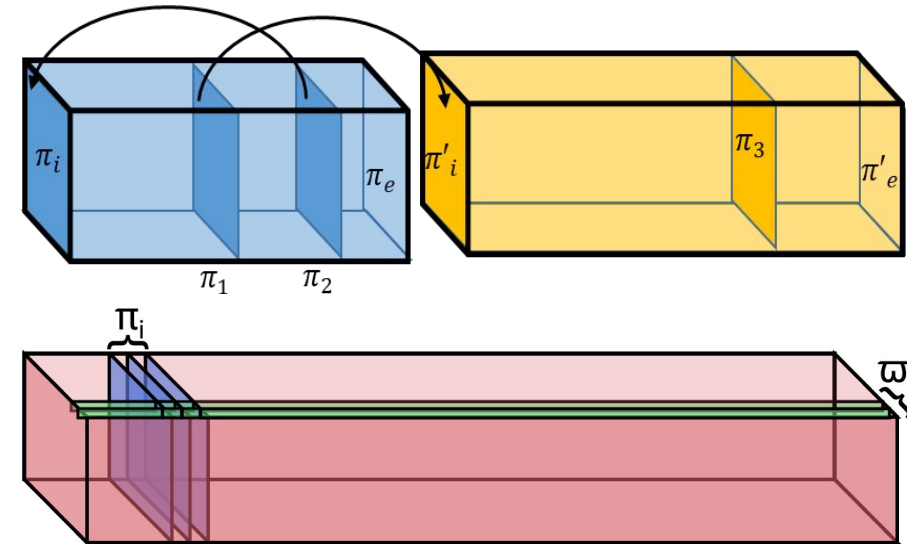
MareNostrum için talep edilen core saati

AFTBL

Software
Particular libraries
Parallel programming
I/O requirements

DNS Türbülanslı Akış Çözücüsü

- **In-house** code written in **Fortran**
- **Two MPI groups** communicate twice per sub-step
 - To send Π_1 plane
 - To synchronize the time step
- **Hybrid MPI-OpenMP** domain decomposition for distributed memory architectures
 - Cross-stream planes (Π_i)
 - Pencils (ω_i)
- I/O in parallel **HDF5**
- **FFTW** library for FFT operations



Scalability

458,752 cores on BlueGene/Q

32,768 cores on BlueGene/P

8,192 cores on Cray XC-6

4,096 cores on X86-64

Simes et al., Journal of Computational Physics, 2009

Sillero et al., Journal of Physics: Conference Series, 2013

Borrell et al., Computers & Fluids, 2013

Gungor et al., Journal of Turbomachinery, 2012

Gungor et al., International Journal of Heat and Fluid Flow, 2016

AFTBL

Performance of Software

Kodun Ölçeklendirilmesi

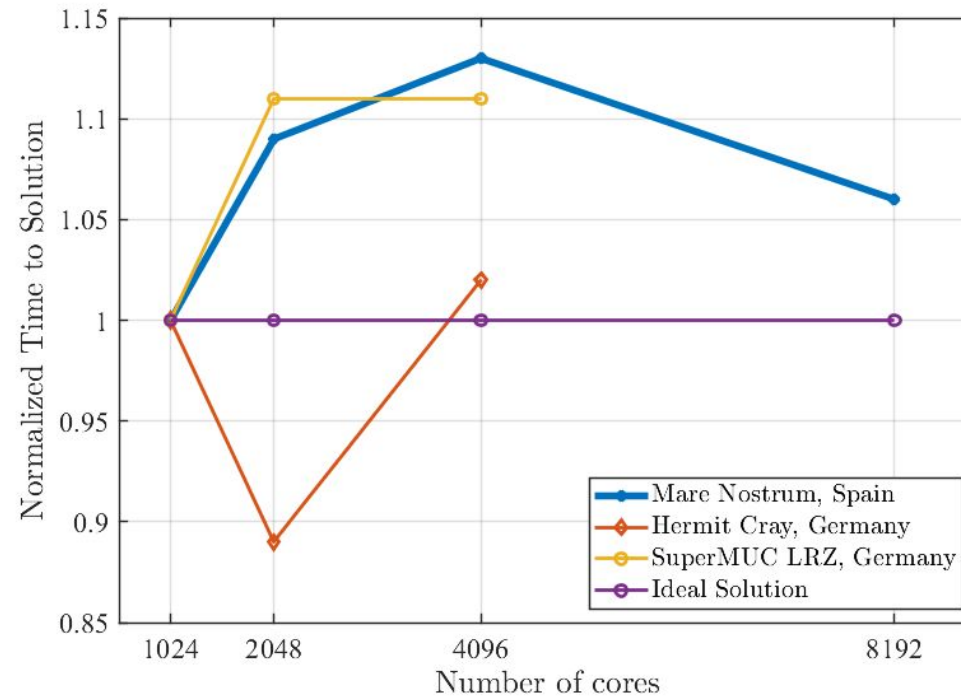
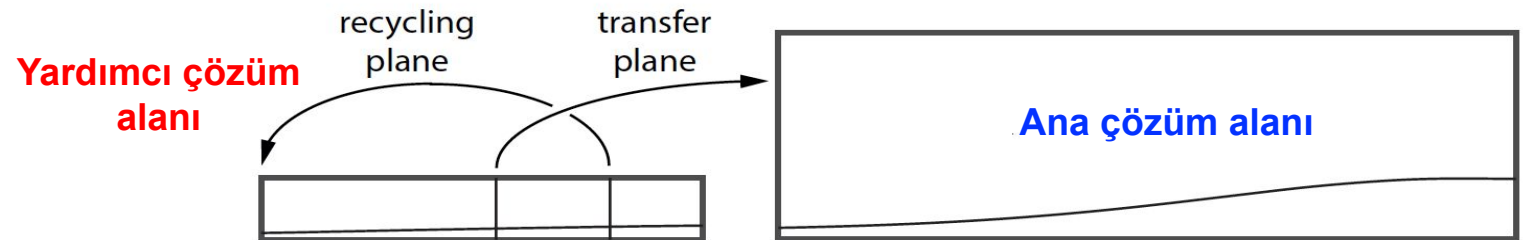


Table 3. Strong scaling test on the Mare Nostrum, with a fixed number of 6.5 billion points. Simulations are run with 8 MPI processes per node and 4 threads per MPI process.

Number of cores	Normalized Time to Solution	Speed-up
1024	1.00	1.0 (reference)
2048	1.09	1.83
4096	1.13	3.54
8192	1.06	7.5

AFTBL

Data Management Plan Storage Analysis



The output of the code

- ✓ 4 checkpoints (restart files divided per variable, u,v,w,p) x 2 domains + statistics + temporal data
- ✓ To store one instant in time requires approximately **300 GB** (Fourier space)

The code generated 400 realizations x 8 checkpoints + statistics + temporal data

- ✓ Roughly **120 TB** of data (in fourier space)
- ✓ **160 TB** of data (in physical space) for the [whole simulation](#)

Total storage requirement and number of files

- **Scratch** directory
 - ✓ 12 TB (log files, checkpoints)
 - ✓ The number of files ~ 1000
- **Archive** directory
 - ✓ 25 TB (checkpoints, statistics,..)
 - ✓ The number of files ~ 5000
- **Home** directory
 - ✓ 5 TB (source and scripts)
 - ✓ The number of files ~ 100

AFTBL

Personnel and Management plan

Dr. Mark Phil Simens, Co-Principal Investigator, İspanya

- Data analizi
- Sonuçların literatürle karşılaştırılması

Prof. Yvan Maciel, Araştırmacı, Laval Üniversitesi, Kanada

- Data analizi
- Sonuçların literatürle karşılaştırılması

Taygun Recep Güngör, Doktora Öğrencisi, Araştırmacı, İTÜ

- Simülasyonların koşturulması
- Data transferi
- Datanın post processi
- Data analizi

AFTBL

Başvurunun Değerlendirilmesi



Bilimsel değerlendirme:

Proje önerisinin çağrıya uyumu



Bilimsel değerlendirme:

Proje önerisinin detayları



Teknik değerlendirme:

Proje teknik detayları

AFTBL

Başvurunun Değerlendirilmesi



Bilimsel değerlendirme:

Proje önerisinin çağrıya uyumu

- Projenin bilimsel ve teknik yönü
- Proje çıktısı Avrupadaki araştırma çalışmalarıyla alakalı mı?
- Proje Tier-0 kaynaklarına ihtiyaç duyuyor mu?
- Proje çıktısı yüksek impact faktörlü dergilerde yayın olabilir mi?

AFTBL

Başvurunun Değerlendirilmesi



Bilimsel değerlendirme: Proje önerisinin detayları

Kalite:

- Projenin orijinal katkısı ve güncelliği
- Projenin yenilikçiliği
- Metodolojinin uygunluğu

Proje Takımı:

- Proje takımının başarı geçmişinin uygunluğu
- Projede ekibinin uzmanlık alanları

Etki:

- Avrupa/Dünya'ya katkı
- Ticari/toplumsal/bilimsel çıktılar
- Çıktıların yayılması

Kaynaklar ve Yönetim:

- Proje takımının birbiri ile uyumu
- Proje planı (Gantt chart)
- Proje için gerekli insan kaynağı

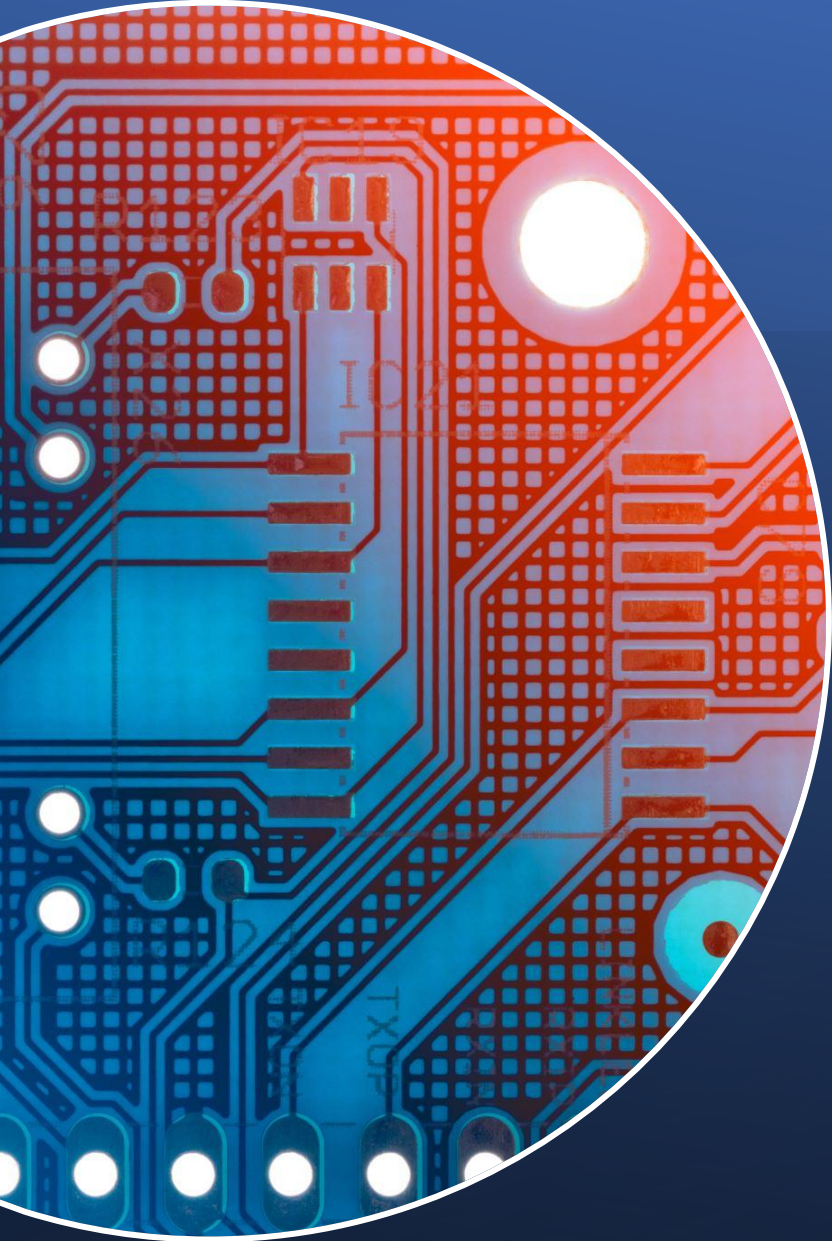
AFTBL

Başvurunun Değerlendirilmesi



Teknik değerlendirme: Proje teknik detayları

- Kod ölçeklendirmesi
- Proje planı
- Data transfer stratejisi
- Input/Output dosya sayısı



Marconi KNL

Intel Xeon işlemci
~250.000 çekirdek
11Pflop/s
Kullanım dışı

Kullanım süresi: 8 ay

+ 3 ay ek süre

Marconi 100

Intel Xeon işlemci
~32.000 çekirdek
32 Pflop/s
Aktif

Kullanım süresi: 4 ay

Galileo

Intel Xeon işlemci
~30.000 çekirdek
1.5 Pflop/s
Kullanım dışı

Kullanım süresi: 2 ay

Proje Yönetimi ve Teknik Destek

Proje Yönetimi

- ✓ **Zaman çizelgesine uymak için önceden planlamak büyük önem taşıyor**
 - Kodun önceden derlenmesi önemli (PRACE Preparatory Access)
 - Simülasyon parametreleri hazır olmalı. Eğer hazır değilse zaman çizelgesinde simülasyon kurulumuna yer verilmeli
 - Depolama stratejisi önceden planlanmalı
 - Kodun hiçbir zaman 7 gün 24 saat çalışmayacağı göz önünde bulundurulmalı.
Maximum wall-time: 24 saat
- ✓ **Kodu derleme süreci her makinada farklı geliyor**
 - Software modellerindeki farklar
 - Compiler farkları
- ✓ **Teknik destek almadan kodu derlemek imkansız olabiliyor**
 - Marconi 100'de kodu derlemek 1.5 ay sürdü
- ✓ **Herhangi bir sebepten dolayı simülasyonlara geç başlamak veya ara vermek kaynakların hepsinin kullanılmamasına sebep oluyor.**
- ✓ **Makinalardaki **priority** her zaman tahmin edilebilir değil o yüzden emniyet faktörü koyulmasında fayda var.**

Proje Yönetimi ve Teknik Destek

Proje Yönetimi

- ✓ Hak kazanılan makinaya dair **wiki** sayfalarını dikkatli okumak önemli, gerekli bilginin büyük bir kısmı buralardan öğrenilebilir ve her makinanın kendine ait kuralları oluyor.
 - İnteraktif job'ların çalışması
 - Debug, production veya uzun işler için farklı queue'lar
 - Depolama stratejisi (scratch, project, archive)
- ✓ Uzun ve kısa vadeli **depolama** ayrımı iyi yapılmalı, çok fazla data taşımak bazı sistemlerde problem yaratabiliyor.

Teknik Destek

- ✓ Çözümü uzun süren problemler için teknik ekibe danışmaktan **çekinilmemesi** gerekiyor.
- ✓ Teknik ekip çözümü sizin için uzun sürecek veya imkansız olacak bazı problemleri çok kısa sürede çözebilir.
 - Run sürecinde ortaya çıkan hataların giderilmesi
 - Core-saat bütçesine bağlı olarak job submission'da limitlerin arttırılması (daha çok node/core/memory kullanma izni)
 - İşlerin queue'da uzun süreli beklemesi durumunda priority arttırımı

EU Prace Projeleri SCI / SCI-E Yayınlar



Dr Ayşe Gül Gungör

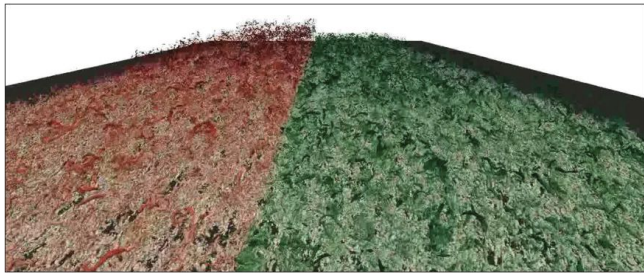
“By enabling more energy efficient design, this research aims at cleaner and more efficient power generation and a reduction in fuel consumption to minimise our emissions of CO₂”



PRACE Women in HPC Magazine 2015

Tackling turbulence to minimise emissions

Advances in modern supercomputers are for the first time allowing researchers to get to grips with the physics of wall-bounded turbulence in adverse pressure gradient (APG) environments, a leap that could mean big changes for the future of our energy consumption



- Gungor, T.R., Maciel, Y., Simens, P.M. & Gungor, A.G. 2021, History effects in turbulent boundary layers under pressure gradient, Journal of Fluid Mechanics (*In preparation*)
- Gungor, T.R., Maciel, Y., & Gungor, A.G. 2021, Energy transfer mechanisms in adverse pressure gradient turbulent boundary layers , Journal of Fluid Mechanics (*submitted*)
- Maciel, Y., Wei, T., Gungor, A.G., Simens, M.P. 2018, Outer scales and parameters of adverse pressure gradient turbulent boundary layers, Journal of Fluid Mechanics
- Simens, M.P., Gungor, A.G. 2018, Influence of the transition of a laminar separation bubble on the downstream evolution of strong adverse pressure gradient turbulent boundary layers, European Journal of Mechanics B / Fluids
- Kitsios, V., Sekimoto, A., Atkinson, C., Sillero, J.A., Borrell, G., Gungor, A.G., Jimenez, J., Soria, J. 2017, Direct numerical simulation of a self-similar adverse pressure gradient turbulent boundary layer at the verge of separation, Journal of Fluid Mechanics
- Maciel, Y., Gungor, A.G., Simens, M.P. 2017, Structural differences between small and large momentum-defect turbulent boundary layers, International Journal of Heat and Fluid Flow
- Kitsios, V., Atkinson, C., Sillero, J.A., Borrell, G., Gungor, A.G., Jimenez, J., Soria, J. 2016, Direct numerical simulation of a self-similar adverse pressure gradient turbulent boundary layer at the verge of separation, International Journal of Heat and Fluid Flow
- Gungor, A.G., Simens, M.P., & Jiménez, J. 2012, Direct numerical simulations of wake-perturbed separated boundary layers, Journal of Turbomachinery

Teşekkürler

Doç. Dr. Ayşe Gül Güngör

ayse.gungor@itu.edu.tr