



## Comparación de los rendimientos presentados por un Clúster y un Servidor al realizar Simulaciones de Dinámica Computacional de Fluidos (CFD)

Agustín Barrientos-Yépez\*, Raúl Pérez-Alonso, Alberto F. Aguilera-Alvarado

Universidad de Guanajuato

División de Ciencias Naturales y Exactas

Departamento de Ingeniería Química

Noria Alta S/N, Col. Noria Alta, CP 36050, Guanajuato, Gto., MÉXICO

\*Fax: (473) 7320006 Ext. 8108. Correo-e: agustinby@ugto.mx

**Resumen** – En este estudio se muestran los rendimientos presentados por un clúster de 120 núcleos y un servidor de 48, al realizar simulaciones de CFD usando el paquete FLUENT™. El clúster consta de 30 procesadores de 4 núcleos cada uno, el cual ha sido integrado usando el sistema de administración de HPC (**High Performance Computing**) denominado Cónдор, mientras que el Servidor consta de 4 procesadores de 12 núcleos cada uno. Se ha encontrado que es mayor el rendimiento presentado por el Servidor, debido a que, por diseño, el hardware integra los 48 núcleos como una unidad, en tanto que el clúster activa solo un procesador de 4 núcleos cuando interactúa con el paquete FLUENT™. Ello implica que debe complementarse la configuración del clúster con el objeto de que active más núcleos cuando sean requeridos por FLUENT™.

**Abstract** - This work discusses the performance attained by a cluster of 120 cores and a server machine of 48 cores, executing CFD simulations using the FLUENT™ package. The cluster consists of 30 processors, 4 cores each, which has been integrated using the management system HPC (High Performance Computing) called Condor, while the 4-processor server machine is serviced with 12 cores each. We have found that higher performance is presented by the server, because by design, the hardware integrates the 48 cores as a unit, while the cluster only activates four processor cores when interacting with the FLUENT™ package. The latter suggests that the cluster configuration should be complemented in order to activate more cores when required by the FLUENT™ package.

**Palabras Claves:** CFD, Computación Dinámica de Fluidos, FLUENT, HPC, rendimiento, procesamiento paralelo.

### I. Introducción

En el Departamento de Ingeniería Química de la División de Ciencias Naturales y Exactas del campus Guanajuato de la Universidad de Guanajuato, existen varias áreas de investigación, las cuales requieren del uso de HPC en sus procesos de simulación. Una de tales áreas es la CFD (Computación Dinámica de Fluidos), para la cual se dispone del paquete ANSYS-FLUENT.

Por otra parte, como parte de las actividades de la línea de investigación denominada: Procesos directos de obtención de compuestos

primarios de silicio a partir de silicio y silicatos naturales, se han llevado a cabo experimentos para sintetizar tetraetoxisilano (TEOS) tanto a nivel laboratorio como a nivel planta piloto.

Contando con estudios que permiten realizar la caracterización hidrodinámica del reactor de la planta piloto en el proceso de síntesis de TEOS, en el Departamento surgió la idea de comparar los rendimientos de los sistemas de cómputo disponibles, usando el mismo caso de CFD simulado en ambos.

## II. Sistema a modelar

Se trata de simular la hidrodinámica de la reacción de síntesis de tetraetoxisilano (TEOS). El mezclado se lleva a cabo en un reactor de 20 litros de capacidad. Se desea conocer los perfiles de velocidad y concentración de especies considerando solo la etapa de mezclado.

En la Tabla 1 se muestran las características del reactor y en la Figura 1 se muestra una vista del mismo

Tabla 1. Características del Reactor

Reactor	altura	0.31 m
	diámetro	0.25m
	fondo	ASME 10%
Entrada lateral	longitud	0.1 m
	diámetro	0.02 m
	posición	0.15 m
Entrada N2	longitud	0.05 m
	diámetro	0.02 m
	posición	fondo
Ventoeo	longitud	0.05 m
	diámetro	0.02 m
	posición	0.26 m

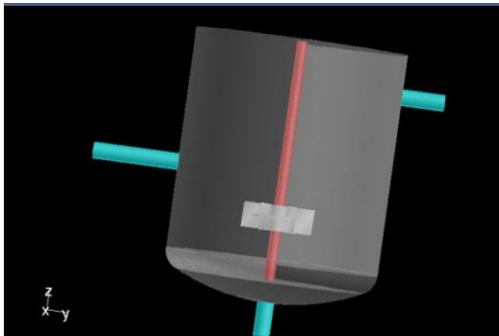


Figura 1. Reactor de 20 litros con ingreso y salida de flujos y agitador tipo Rushton.

El reactor cuenta con un agitador tipo Rushton de 0.08325 m de diámetro y 6 aspas, el cual gira a una velocidad de 300 rpm.

## III. Modelo de CFD

Las ecuaciones básicas del modelo son las siguientes:

### Ecuación de continuidad:

Acumulación de masa      Emisión neta de masa      Transferencia interfacial neta

$$\frac{1}{\rho_{rq}} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right]$$

donde:

$\rho_{rq}$ : densidad de fase de referencia, o densidad promediada por volumen de fase q en el dominio de solución.

$\alpha_q$ : fracción volumen del fluido q.

$\rho_q$ : densidad del fluido q.

$\vec{v}_q$ : vector de velocidad.

$\dot{m}_{pq}$ : transferencia de masa de la fase p a la fase q.

### Ecuación de Momento

Acumulación de momento      Emisión neta de momento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) \\ = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \\ \text{Gradiente de presión} \quad \text{Tensor de stress} \quad \text{Influencia de la gravedad} \end{aligned}$$

$$\sum_{p=1}^n (\vec{K}_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp})$$

Fuerza de interacción interfacial      Transferencia interfacial de momento

donde:

$\bar{\tau}_q$ : tensor de stress de la fase q, definido como

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \vec{v}_q^T) + \alpha_q \left( \lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \cdot \vec{v}_q \bar{I}$$

$\mu_q$ : densidad (shear) de la fase q.

$\lambda_q$ : densidad (bulk) de la fase q.

$\bar{I}$ : tensor unitario con componentes  $\delta_{ij}$ .

$\alpha_q$ : fracción volumen del fluido q.

$\vec{v}_q$ : vector de velocidad.

$\dot{m}_{pq}$ : transferencia de masa de la fase p a la fase q.

Dichas ecuaciones corresponden al modelo Euleriano para flujos multifásicos. También se usa el modelo de turbulencia *ke*, el método de presión y el método no estacionario.



Como se observa se trata de las ecuaciones de Navier Stokes, las cuales no tienen solución analítica. El método que se usa para resolver el sistema de ecuaciones es discretizar el dominio y sustituir las ecuaciones diferenciales por ecuaciones algebraicas, por medio de la aplicación del Método de Volumen Finito.

Al aplicar dicho método aparecen los conceptos de nodos y malla. En este caso la malla consta de 275,000 celdas.

El objetivo es simular el comportamiento de un sistema durante un período dado de tiempo, lo cual requiere definir una longitud de paso de tiempo (time step), y un número de iteraciones por paso de tiempo. El sistema debe converger para pasar al siguiente paso de tiempo.

Debido a que los pasos de tiempo usuales son del orden de diezmilésimas de segundo, se observa la necesidad de contar con sistemas de cómputo capaces de realizar un gran número de operaciones, o sea sistemas HPC.

#### IV. Sistemas HPC utilizados

En el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Guanajuato se dispone de dos sistemas de HPC para realizar simulaciones.

Un sistema consta de 30 unidades tipo Servidor Dell R300 quadcore (de 1 procesador de 4 núcleos cada uno, lo que da un total de 120 núcleos), que conforman un cluster integrado por medio del software libre denominado Cónдор, diseñado en la Universidad de Wisconsin.

El otro sistema consiste en dos servidores, Dell Power Edge R815, cada uno de los cuales consta de 4 procesadores de 12 núcleos cada uno, dando un total de 48 núcleos por servidor. Se está en proceso de integrar ambos servidores en un cluster, usando también el software Cónдор.

Respecto al Servidor Dell R815 se utilizaron los protocolos openmpi y SSH para la comunicación entre los procesadores y sus núcleos. Se observó que si no se usaban estos protocolos, solo se podía usar un solo procesador y sus núcleos, pero no los otros procesadores ni sus correspondientes núcleos, aunque venga integrado todo en un solo equipo.

En consecuencia, si se usaba el siguiente comando en el servidor

```
fluent 3d -t48 -  
cnf=/home/raul.perez/mpd.hosts -ssh
```

aunque tuviera el protocolo SSH solamente usaba 12 núcleos, que son los que contiene un solo procesador. No usaba los cuatro procesadores con sus 12 núcleos, que serían los 48 núcleos totales del servidor.

Lo anterior se solucionó al cambiar el protocolo de comunicación que por defecto utiliza el FLUENT, llamado hp, por el openmpi, con la siguiente instrucción

```
fluent 3d -t48 -mpi=openmpi -cnf=/home  
/raul.perez/mpd.hosts -ssh
```

Al superar los problemas de comunicación entre los núcleos que conforman los sistemas HPC se procedió a comparar el desempeño de los dos sistemas (clúster y servidor) con los mismos datos de entrada para procesarlos en forma paralela. Lo anterior produjo los resultados que se comentan enseguida.

#### V. Resultados

Inicialmente se realizó la misma simulación en el Servidor Dell300, utilizando un diferente número de núcleos, observándose lo siguiente:



	Servidor Dell R300	Servidor Dell R300	Servidor Dell R300
Núcleos usados	4	6	12
Tiempo para converger 100 time steps	1 hora 4 minutos	32 minutos	40 minutos

La tendencia no es clara. Al pasar de 4 a 6 núcleos se observa una disminución en el tiempo computacional, lo cual era esperado. Sin embargo al pasar de 6 a 12 núcleos se observa un incremento en el tiempo de cómputo, lo cual no era de esperarse. Dicha tendencia en incremento de tiempo se observó al solicitar un mayor número de núcleos.

Adicionalmente se realizó la misma simulación en los dos servidores, observándose lo siguiente:

	Servidor Dell R815	Servidor Dell R815	Servidor Dell R300
Núcleos usados	48	12	4
Tiempo para converger 1000 time steps	1 hora 34 minutos	2 horas 30 minutos	3 hora 40 minutos

En este caso se observa una tendencia esperada: cuando se solicitan más núcleos al Servidor Dell R815, el tiempo de cómputo disminuye, aunque no linealmente. Por otra parte el desempeño del Servidor Dell R815 es mejor al desempeño del Servidor Dell R300, pues el R815 usa un mayor número de núcleos.

¿Como explicar los resultados?

Primero se muestra copia parcial de una pantalla del Servidor Dell R300 que muestra que se le han requerido 48 núcleos al programa:

```

-----
ID      Comm.  Hostname  O.S.
-----
n47    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n44    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n41    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n38    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n35    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n32    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n29    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n26    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
n23    openmpi trabajo_02.dcea Linux-64
-----

```

Figura 2. Se solicitan 48 núcleos al Servidor R300

Posteriormente se encontró que cuando se le solicitan más de 4 núcleos al Servidor R300 lo que hace es activar un quadcore, al cual divide en el número de núcleos virtuales solicitados, ralentizando el proceso.

Por otra parte, el Servidor Dell R815, activa el número de núcleos solicitados (físicos) mientras sea menor o igual a 48.

La forma de detectar que se trata de núcleos virtuales es a través del comando de Scheme: (show-affinity). En las figuras siguientes se muestran ejemplos de dicho comando para los casos mencionados.

```

> (show-affinity)
9999999: 0,1,2,3
0: 0,1,2,3
1: 0,1,2,3
2: 0,1,2,3
3: 0,1,2,3
4: 0,1,2,3
43: 0,1,2,3
44: 0,1,2,3
45: 0,1,2,3
46: 0,1,2,3
47: 0,1,2,3
()
>

```

Figura 3. El comando show-affinity muestra que los núcleos asignados por el Servidor Dell R300 son virtuales

```

> (show-affinity)
9999999: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20
0: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20
1: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20
2: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20
3: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20
4: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20
5: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20

```

```

43: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10 40,41,42,43,44,45,46,47
44: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10 40,41,42,43,44,45,46,47
45: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10 40,41,42,43,44,45,46,47
46: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10 40,41,42,43,44,45,46,47
47: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10 40,41,42,43,44,45,46,47

```

Figura 4. El comando show-affinity muestra que los núcleos asignados por el Servidor Dell R815 son físicos



## VI. Conclusiones

Se ha encontrado que es mayor el rendimiento presentado por el Servidor Dell R815, debido a que por diseño, el hardware integra los 48 núcleos como una unidad, en tanto que el Clúster (Servidor Dell R300) activa solo un procesador de 4 núcleos cuando interactúa con el paquete FLUENT.

Ello implica que debe revisarse y complementarse la configuración del Clúster (Servidor Dell R300) con el objeto de que active físicamente (y no de manera lógica) más núcleos, cuando sean requeridos por FLUENT.

Por otra parte, debido a que el Servidor Dell R815 integra 48 núcleos, su eficiencia de cómputo es alta, pero conviene integrar los dos servidores disponibles de este tipo, para que funcionen como un cluster, cuando así lo requieran los trabajos a realizar. Se puede visualizar el contexto en los resultados cuyo artículo es: Alberto F. Aguilera-Alvarado, Raúl Pérez-Alonso, M. Irene Cano-Rodríguez, Agustín R. Uribe-Ramírez, G. Enrique Aguilar-Pérez, and Jesús R. Lugo-Martínez, CFD Study of the Weeping and Flooding Effects in a Nonsymmetrical Sparger in a Stirred Tank, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, (2013), 52 (5), pp: 2141-2151.

## Agradecimientos

Se agradece al Departamento de Ingeniería Química de la División de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad de Guanajuato por el apoyo otorgado para la realización de este proyecto.

## Referencias

- [1] Fluent 6.3 Manual, 2006
- [2] Condor Version 7.7.4. Manual, Condor Team, University of Wisconsin-Madison, 2012

- [3] Scyld Cluster Ware HPC, Administrator's Guide, 2010
- [4] Red Hat Enterprise Linux 6, Cluster Administration, 2011
- [5] Asasnovic K., The Landscape of Parallel Computing Research: A View from Berkeley, University of California at Berkeley, 2006