1 Catalyst介绍



李健



近年来,计算系统在速度和能力方面快速增长。大规模计算在成千上万个处理器的并行系统上执行。因此,并行计算方法和系统是现代计算模拟的核心。随着计算核心数的增加,输入输出(IO)成为限制因子。

计算能力和IO带宽对大规模计算产生深刻影响。

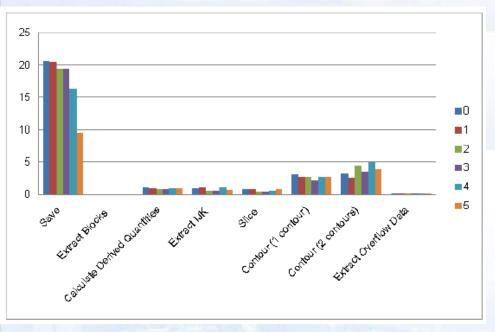


图1.1在桌面电脑上启用6进程在某些分析计算和保存完整数据耗时的比较

传统的模拟过程分为: 前处理(划分 网格、设置边界条件和计算参数等) 计算和后处理(分析和可视化结果) 3个过程独立,但读写大数据成为大型 计算的瓶颈。

当以较低频率保存结果,例如非恒定分析,每10步保存1次结果,将放弃90%的数据。有时,甚至保存单步的完整数据也将超出IO系统的能力。

Catalyst方法将传统的3步整合为1步,即将后处理直接整合到计算过程中:

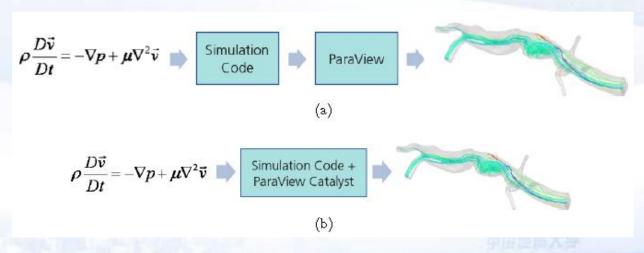


图1.2 传统的(a)和Paraview Catalyst (b)的 工作流程

不用保存完整的数据集到磁盘,IO只要提取相关的信息变量即可。数据提取,诸如等值线(面)、切面或流线等,比完整数据集要小几个数量级。因此,输出提取数据将显著降低IO成本。

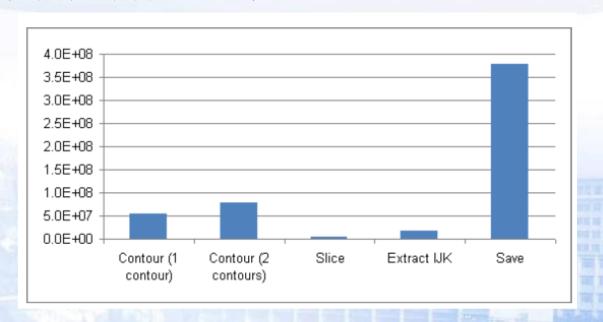


图1.4 比较保存完整数据集与保存特殊分析输出的文件大小(单位: bytes)

Co-processing还可以及时发现问题,停止计算。

使用Catalyst做in-situ可视化的典型流程是:使用Paraview GUI定义模拟的输出,创建Python脚本实施初始化;然后,当模拟启动时,加载该脚本;然后,在模拟执行期间,以同步方式(即模拟在运行中)生成分析和可视化输出。

Catalyst可生成图片,计算统计量,生成制图和提取衍生信息,如多边形数据或等值面,来可视化几何形体或数据。

具体实施Catalyst时考虑2方面:

- (1) 是否降低IO成本是重要的?
- (2)是够这些管线合理地<mark>尺度化了</mark>?否则可视化时会使模拟过程<mark>阻塞</mark>, 危害或影响整体分析周期时间。

但是,Paraview和VTK系统都是并行化的,通常是用于大部分的应用。

