

Развитие программной платформы INMOST: динамические распределенные сетки, автоматическое дифференцирование и линейные решатели

Д.В. Багаев, А.И. Бурачковский, И.Н. Коньшин,
К.Д. Терехов

ИВМ РАН, МГУ, Москва
Стенфордский университет, США

CFD Weekend-2016, Москва, 03.12.2016

План

- Программная платформа INMOST
- Развитие платформы INMOST:
 - динамические сетки,
 - автоматическое дифференцирование,
 - линейные решатели.

Трудности разработчиков CFD кодов

Учет параллельности компьютеров:

- Параллельные структуры данных
- Межпроцессорные обмены данными
- Параллельное формирование линейных систем
- Параллельное решение линейных систем
- Параллельный ввод/вывод

Все это помогает делать INMOST

INMOST

- INMOST is a software platform for development of parallel numerical models on general meshes.
- INMOST (**I**ntegrated **N**umerical **M**odelling and **O**bject-oriented **S**upercomputing **T**echnologies) is a tool for supercomputer simulations characterized by a maximum generality of supported computational meshes, distributed data structure flexibility and cost-effectiveness, as well as cross platform portability.
- Developed in Institute of Numerical Mathematics (INM) of Russian Academy of Sciences

В учебном пособии представлен опыт создания параллельной программной MPI-платформы и графической среды для разработки параллельных численных моделей на сетках общего вида. Технологический комплекс INMOST (Integrated Numerical Modeling and Object-oriented Supercomputing Technologies) – инструмент для суперкомпьютерного моделирования, характеризуемый максимальной общностью поддерживаемых расчетных сеток, гибкостью и экономичностью структуры распределенных данных, кроссплатформенностью, а также графической средой для интерактивного пользовательского интерфейса.

Данное учебное пособие будет полезно разработчикам СИА, инженерам и математикам-вычислителям, деятельность которых связана с суперкомпьютерным моделированием: всем тем, кто непосредственно создает параллельные приложения или использует параллельные численные модели.



ПРОГРАММНАЯ ПЛАТФОРМА
И ГРАФИЧЕСКАЯ СРЕДА

INMOST



Серия
Суперкомпьютерное
Образование

Ю. В. Василевский, И. Н. Коньшин,
Г. В. Копытов, К. М. Терехов

INMOST ПРОГРАММНАЯ ПЛАТФОРМА И ГРАФИЧЕСКАЯ СРЕДА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЧИСЛЕННЫХ МОДЕЛЕЙ НА СЕТКАХ ОБЩЕГО ВИДА



Издательство
Московского
университета

ISBN 978-5-211-06480-5



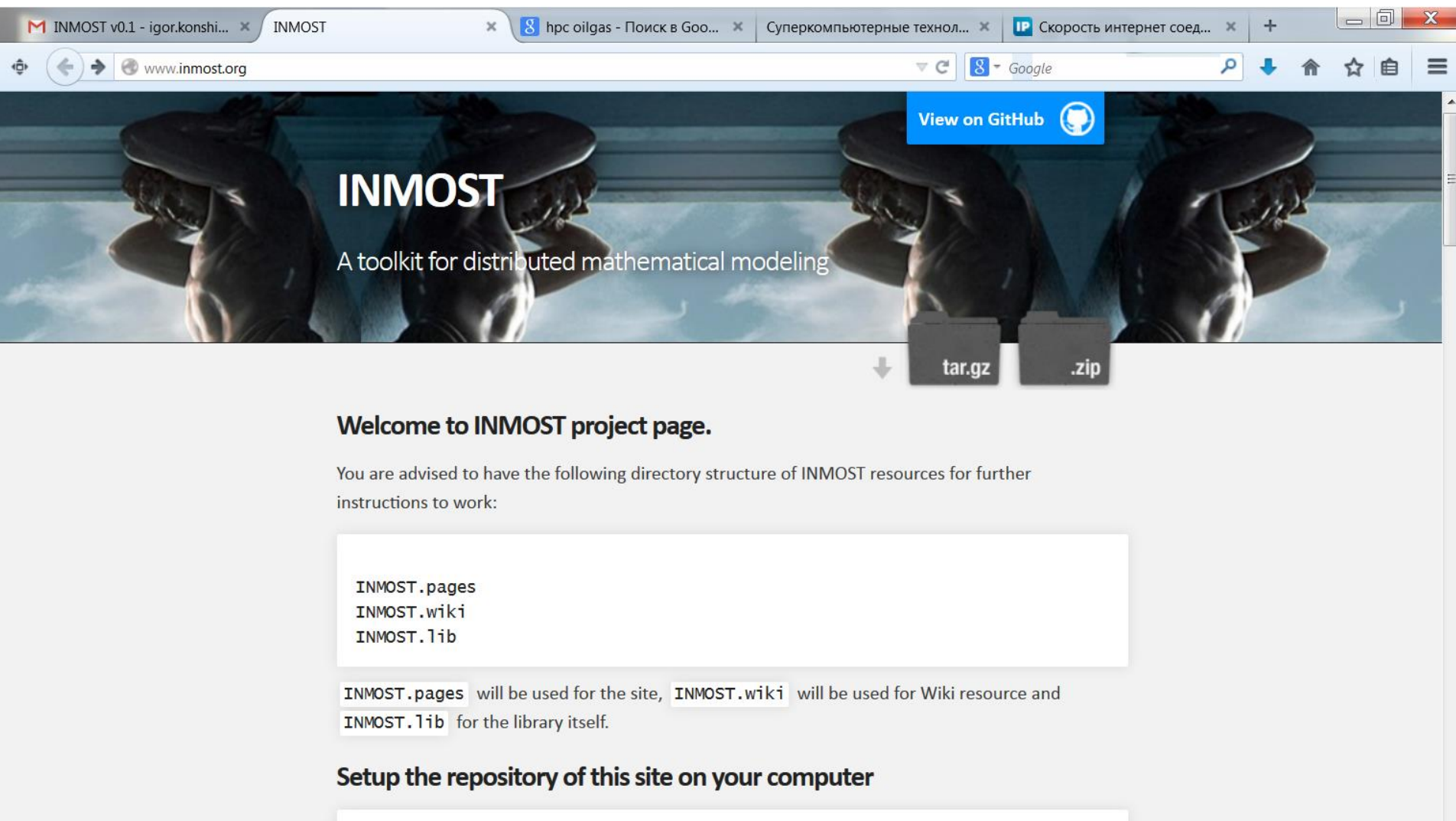
9 785211 064805



Суперкомпьютерный
консорциум
университетов России



INMOST: www.inmost.org



INMOST v0.1 - igor.konshi... x INMOST x hpc oilgas - Поиск в Goo... x Суперкомпьютерные технол... x IP Скорость интернет соедин... x

www.inmost.org

Google

View on GitHub

INMOST

A toolkit for distributed mathematical modeling

tar.gz .zip

Welcome to INMOST project page.

You are advised to have the following directory structure of INMOST resources for further instructions to work:

```
INMOST.pages
INMOST.wiki
INMOST.lib
```

INMOST.pages will be used for the site, INMOST.wiki will be used for Wiki resource and INMOST.lib for the library itself.

Setup the repository of this site on your computer

INMOST: wiki.inmost.org

INMOST v0.1 - igor.konshi... x Home · INMOST-DEV/IN... x hpc oilgas - Поиск в Goo... x Суперкомпьютерные технол... x IP Скорость интернет соедин... x +

GitHub, Inc. (US) https://github.com/INMOST-DEV/INMOST/wiki Google

GitHub This repository Search Explore Features Enterprise Blog Sign up Sign in

INMOST-DEV / INMOST Watch 2 Star 0 Fork 0

Home

Kirill Terekhov edited this page 4 days ago · 12 revisions

Welcome to the INMOST wiki!

Compiling INMOST:

- [Compilation guides](#)

Reporting issues and preparing tests:

- [Guide for testing](#)

Explore included examples:

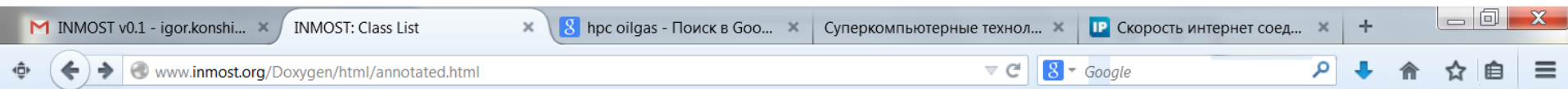
- [List of Examples](#)

Please read before writing Wiki articles:

▼ Pages 29

- [0100 Compilation](#)
- [0200 Compilation Windows](#)
- [0201 Obtain MSVC](#)
- [0202 Obtain MSMPI](#)
- [0203 Compilation INMOST Windows](#)
- [0204 Compilation ParMETIS Windows](#)
- [0205 Compilation Zoltan Windows](#)
- [0206 Compilation PETSc](#)

INMOST: doxygen.inmost.org



INMOST

A toolkit for distributed mathematical modeling

Main Page	Related Pages	Classes	Files	Search
Class List	Class Index	Class Hierarchy	Class Members	

Class List

Here are the classes, structs, unions and interfaces with brief descriptions:


[detail level 1 2 3 4]

▼ N INMOST	
▼ C Automatizator	
C table	
C expr	
C TagMemory	
C Tag	
▼ C TagManager	
C sparse_sub_record	
▼ C Storage	Base class for Mesh , Element , and ElementSet classes
▼ C reference_array	Storage type for representing arrays of Element references
C const_iterator	
C const_reverse_iterator	
C iterator	

Программная платформа

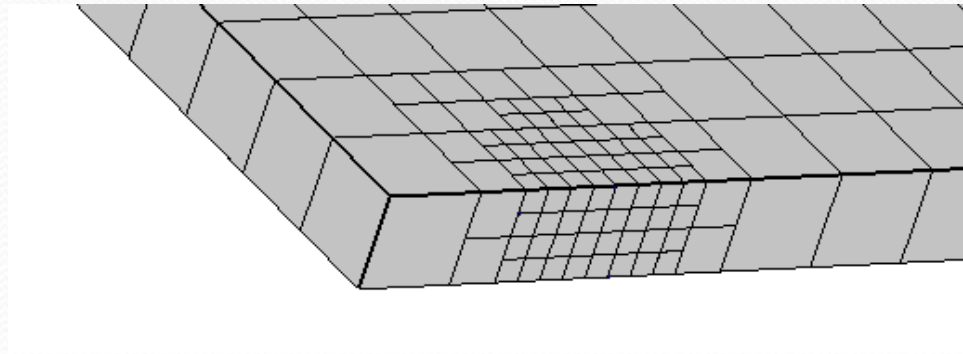
Модули, входящие в состав платформы:

- Модуль сеточных операций,
- Модуль балансировки сетки,
- Модуль составления и решения линейных систем,
- +Модуль автоматического дифференцирования

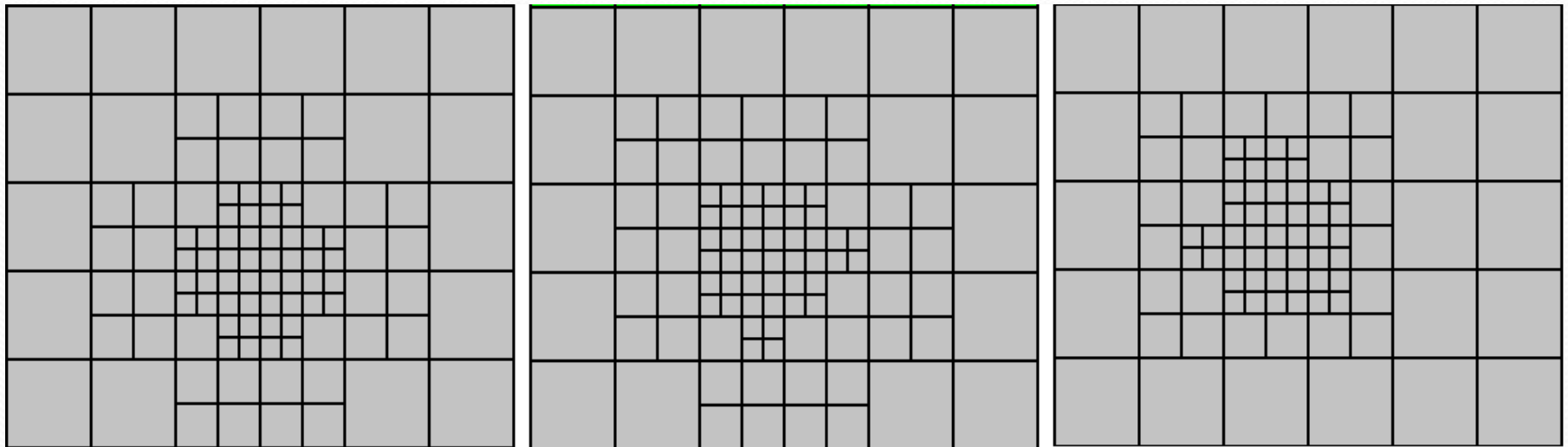


Динамические сетки на основе «восьмидеревьев»

Применение INMOST для работы с динамическими сетками на основе восьмидеревьев

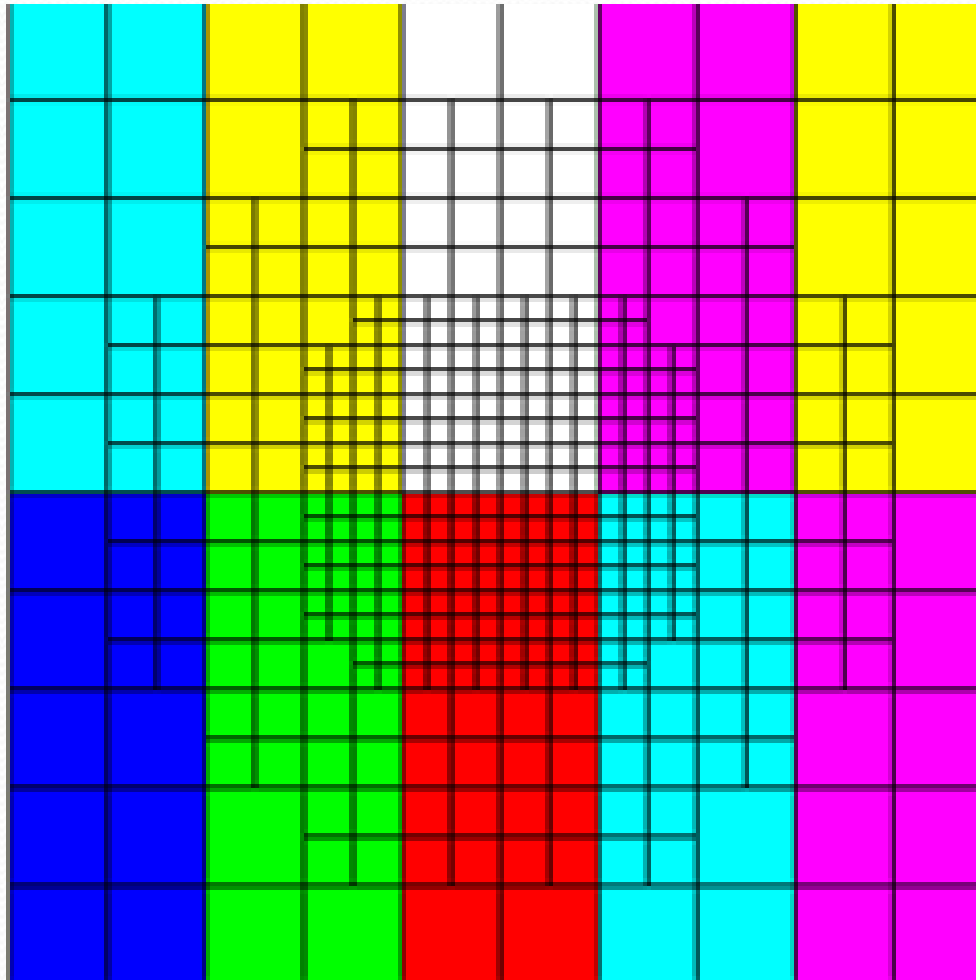


Сгущение сетки в 3-х измерениях

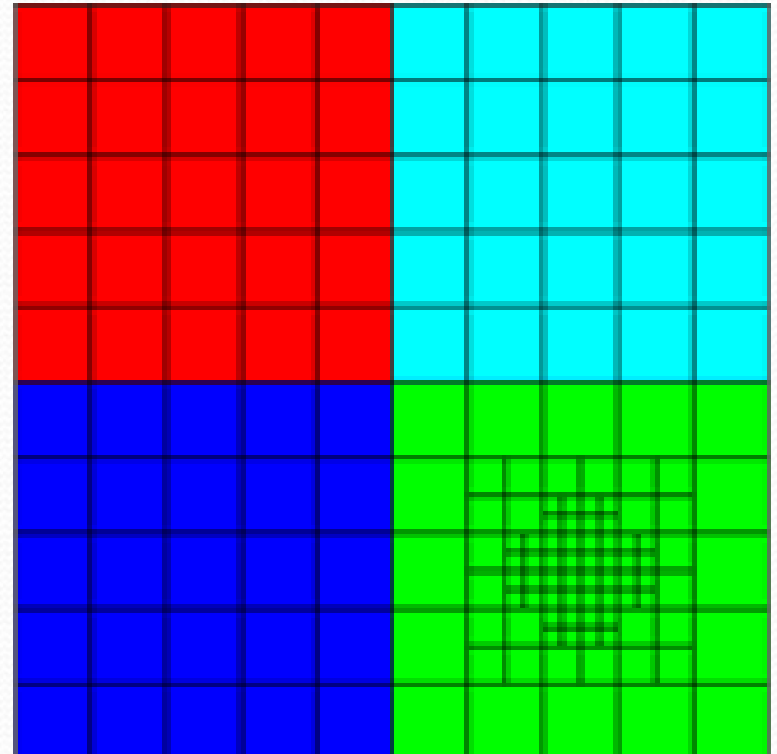
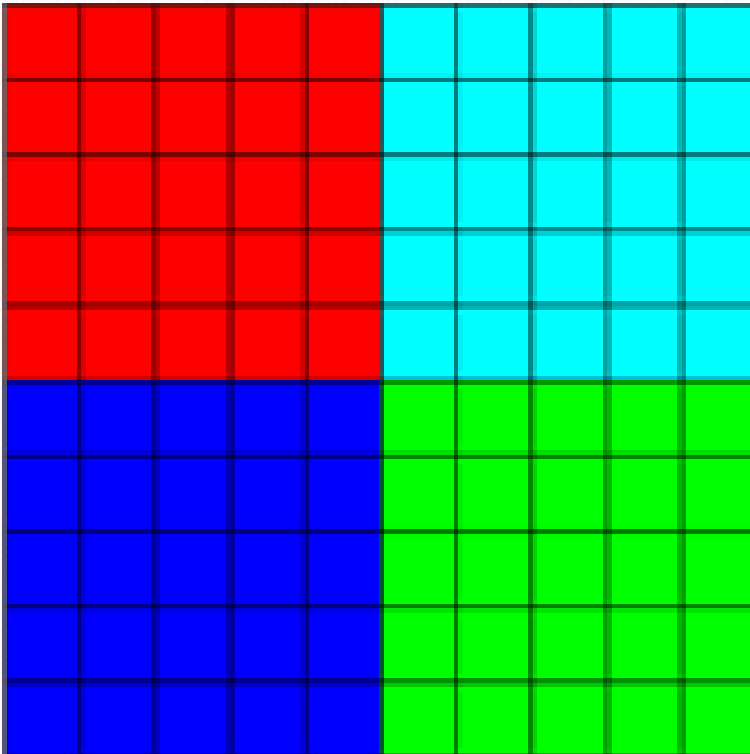


Сгущение сетки вслед за движением курсора мыши

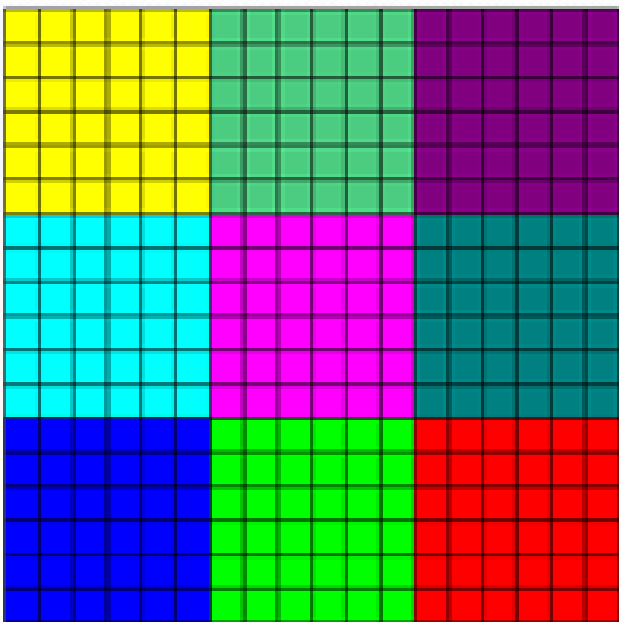
Согласованное измельчение сетки на 10 процессорах



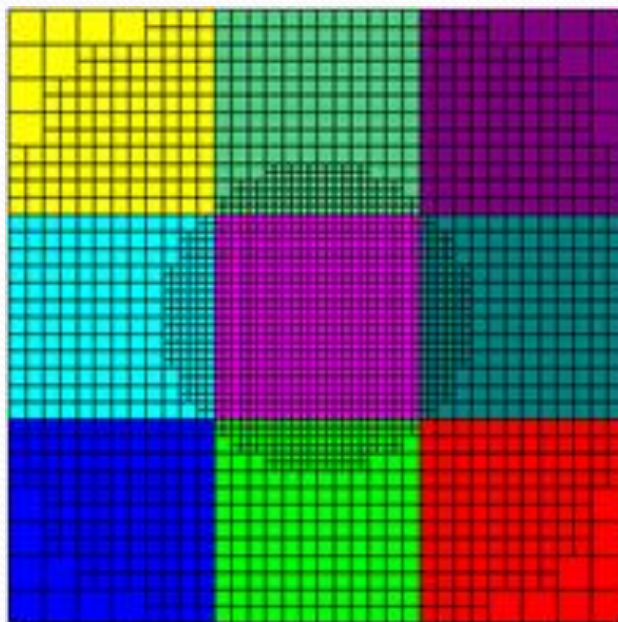
Необходимость балансировки сетки...



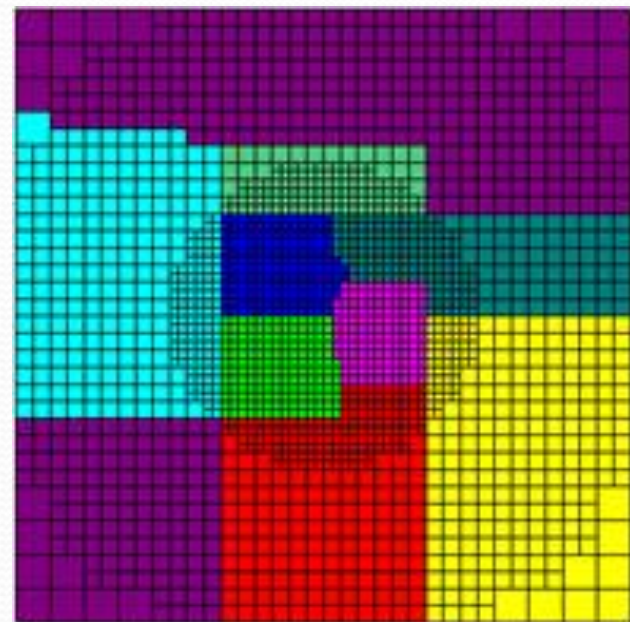
Балансировка сетки с помощью ParMetis




исходная



Распределенные сетки:
адаптированная



после балансировки



Автоматическое дифференцирование

Типы, классы, функции

Автоматическое построение матрицы Якобиана основано на правиле цепочки: итоговое выражение – сумма частных производных с коэффициентами.

Типы данных:

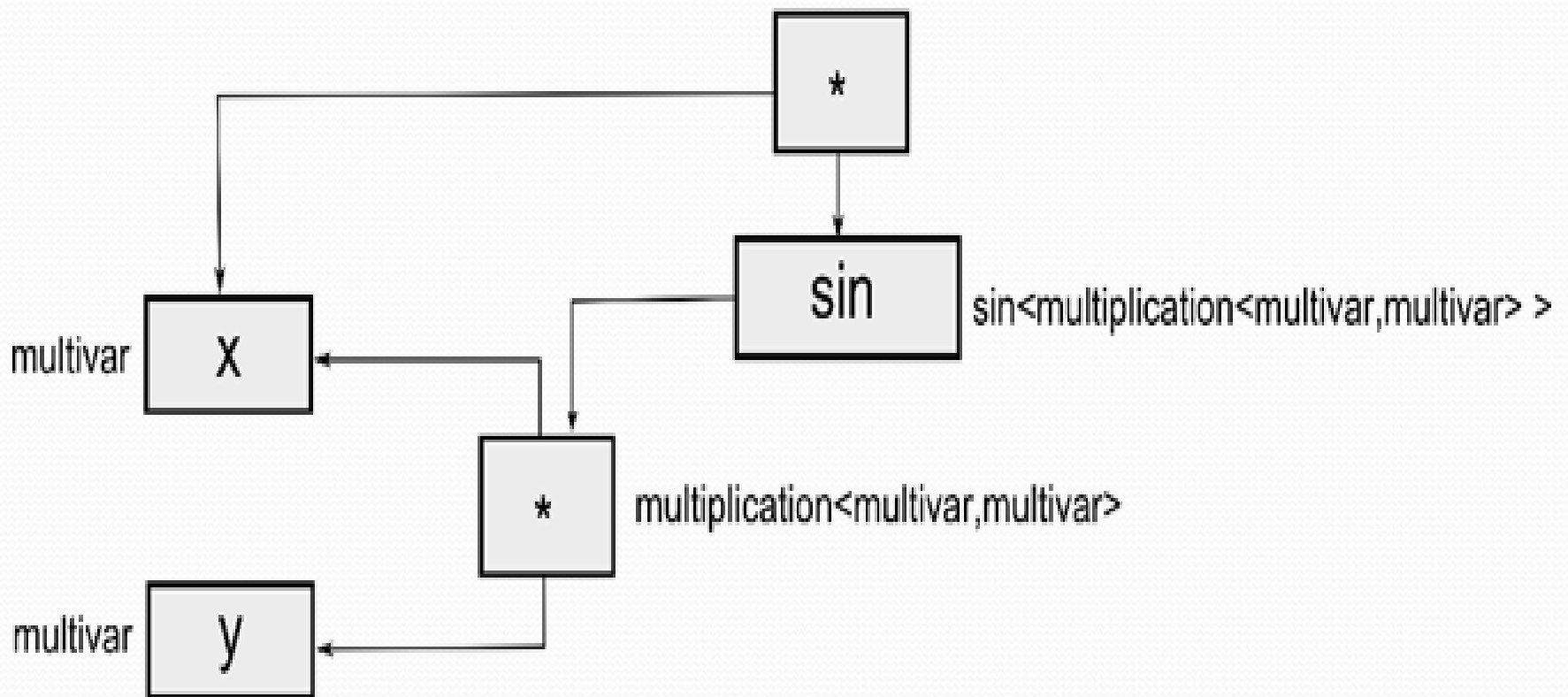
- константы (тип «double»);
- переменной с одной частной производной (класс);
- переменной с множеством частных производных.

Функция «GetJacobian()» строит дерево классов:

«cos(x)» \rightarrow «GetJacobian()» \rightarrow «-sin(x)dx»

Схема дерева классов для операции « $\sin(x*y)*x$ »

multiplication<sin<multiplication<multivar,multivar> >,multivar >



Линейная комбинация разреженных векторов

x



*

y



=

z



Вспомогательные структуры

- Класс «Residual» для построения вектора невязки (тип «Sparse::Vector») и матрицы якобиана (тип «Sparse::Matrix»).
- Класс «Automatizator» для контроля количества основных неизвестных модели, их активации и перенумерации (функции «RegisterDynamicTag()» и «EnumerateDynamicTags()» над ярлыком «Tag»).
- Запись на диск в формате «.pmf» и «.xml».



Линейные решатели,
доступные в рамках INMOST

Внутренние и внешние

Внутренние:

- Inner ILU₂
- Inner DDPQILUC
- Inner MPTILUC
- Inner MPTILU₂
- Inner FCBIILU₂
- Inner K₃BIILU₂

Внешние:

- Trilinos Aztec
- Trilinos Belos
- Trilinos ML
- Trilinos Ifpack
- PETSc
- SUPERLU

Разработан удобный механизм добавления новых линейных решателей в INMOST

Тестирование решателей

Свойства тестовых матриц из коллекции университета Флориды

Матрица	N	NZA	NZA/N
tmt_unsym	917 825	4 584 801	5
tmt_sym	726 713	5 080 961	7
ML_Laplace	377 002	27 582 698	73,1
Transport	1 602 111	23 487 281	14,6
CoupCons3D	416 800	17 277 420	41,4

«tmt_unsym» – моделирование задач электромагнетизма;

«tmt_sym» – моделирование задач электромагнетизма;

«ML_Laplace» – дискретизация уравнения Пуассона;

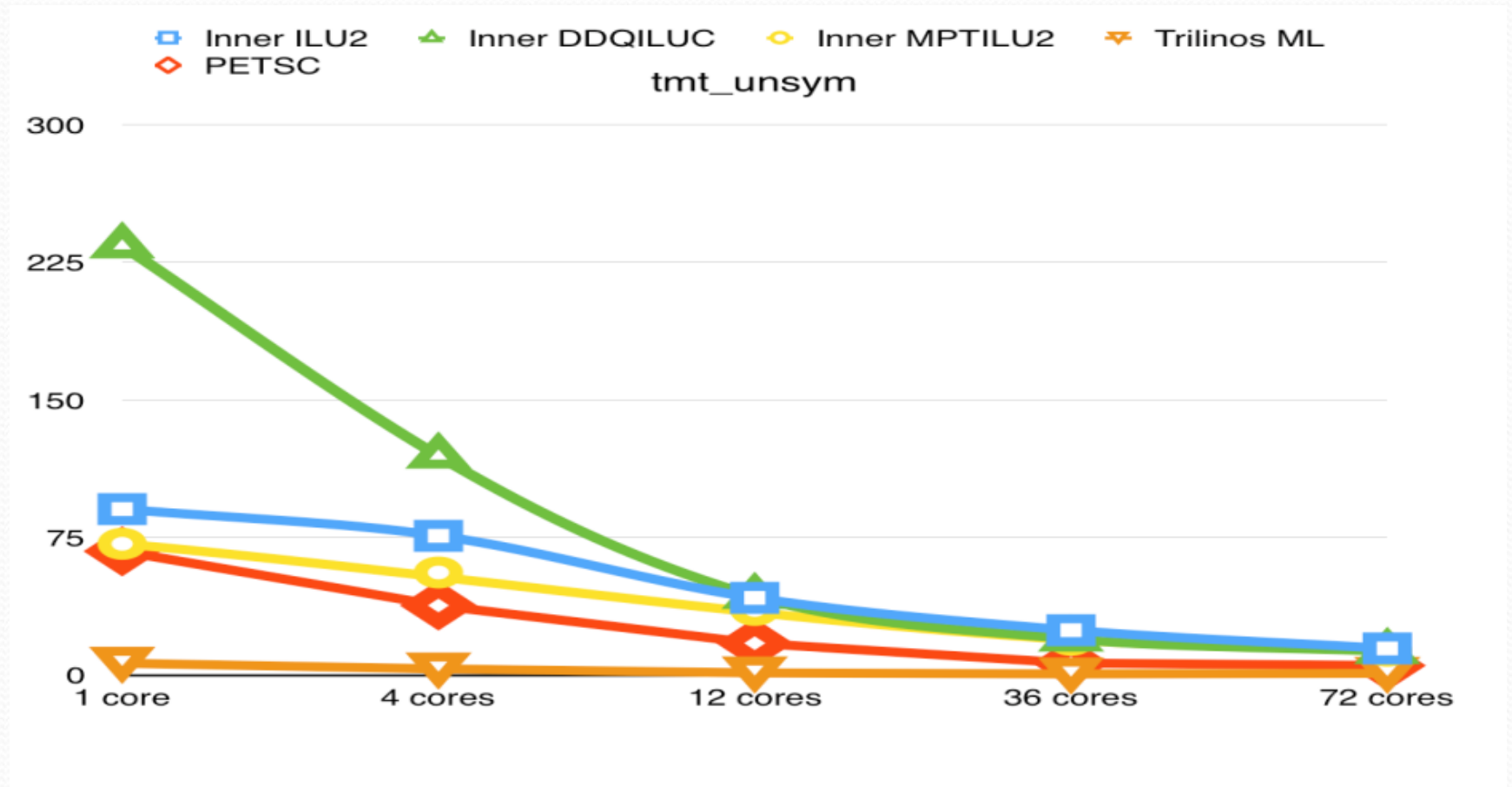
«Transport» – конечноэлементная дискретизация 3-х мерной задачи переноса;

«CoupCons3D» – полностью связанная задача пороэластичности.

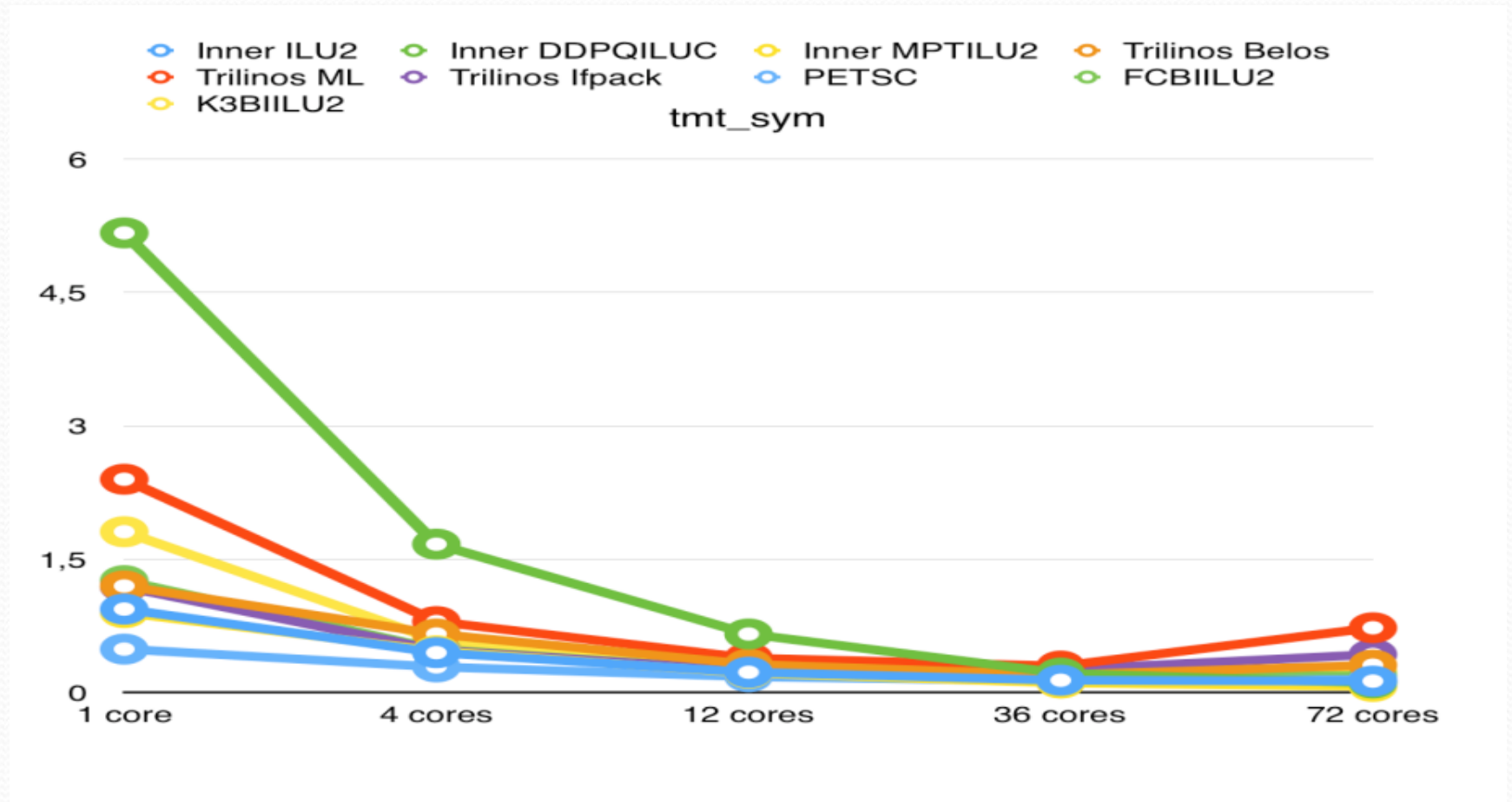
Кластер ИВМ РАН

- Compute Node Asus RS704D-E6;
- 12 ядер (два 6-ядерных процессора Intel Xeon X5650@2.67ГГц);
- Оперативная память: 24 Гб.;
- Дисковая память: 280 Гб.;
- Операционная система: SUSE Linux Enterprise Server 11 SP1 (x86_64);
- Очередь заданий «sixcore»

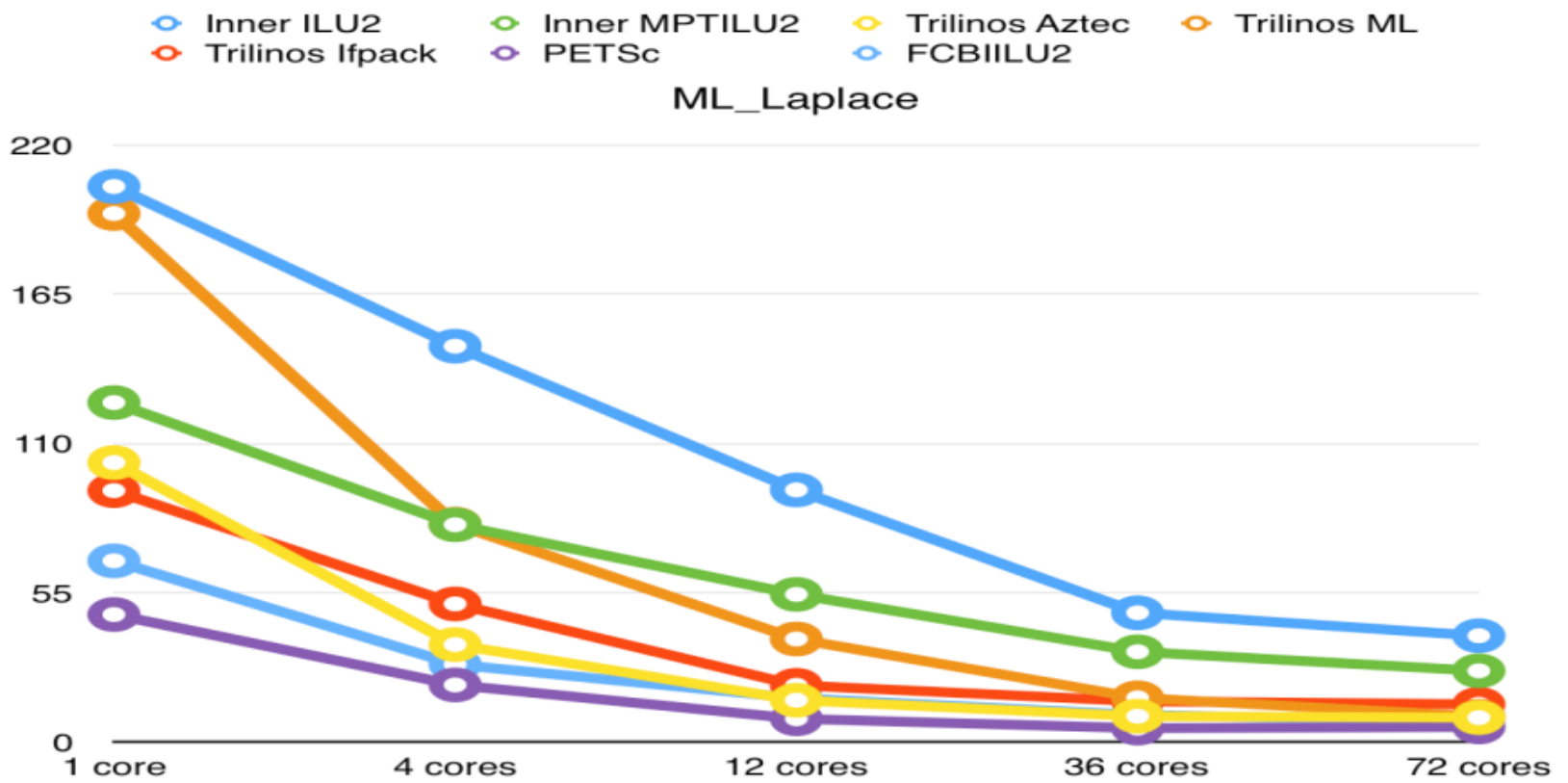
Задача «tmt_unsym»



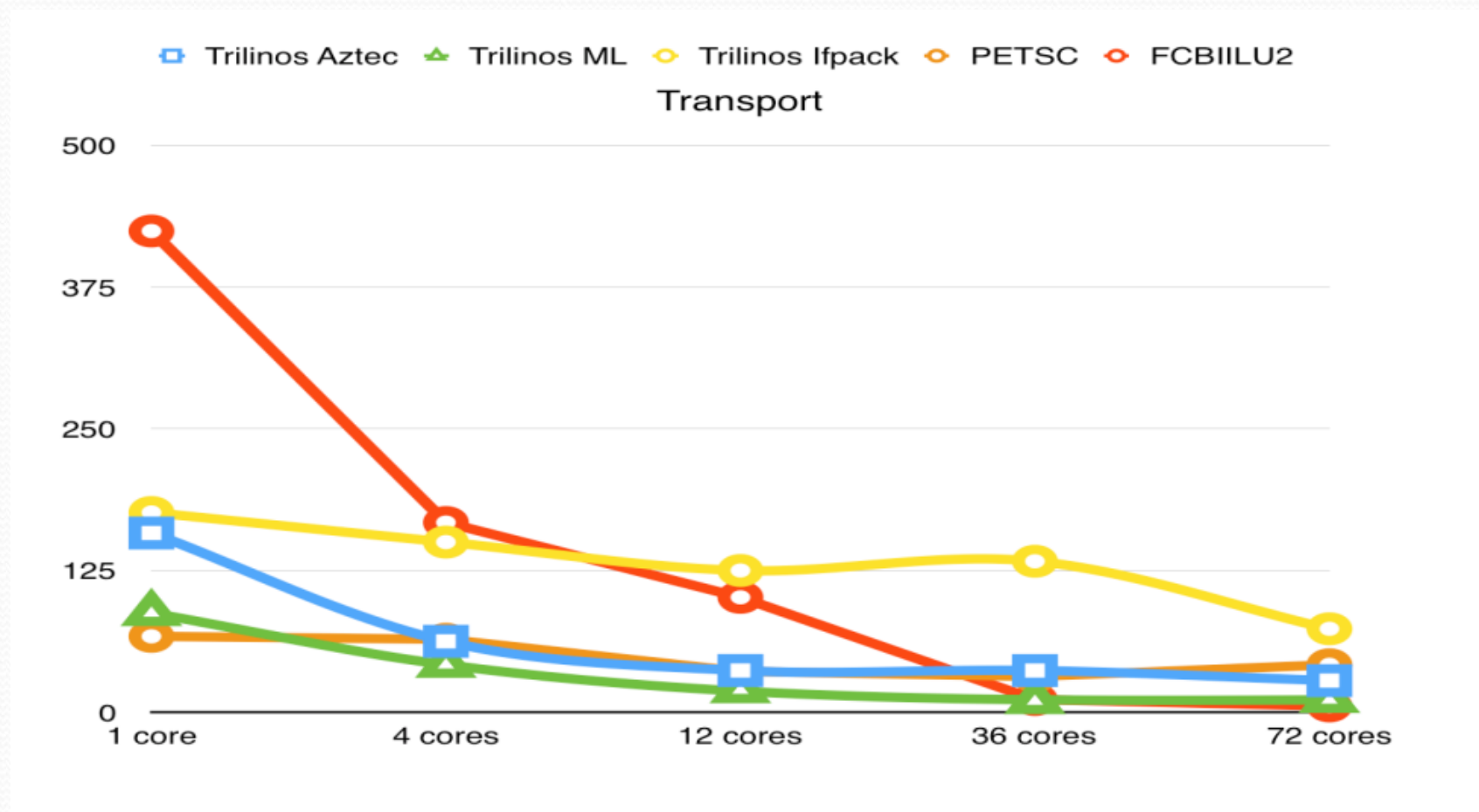
Задача «tmt_sym»



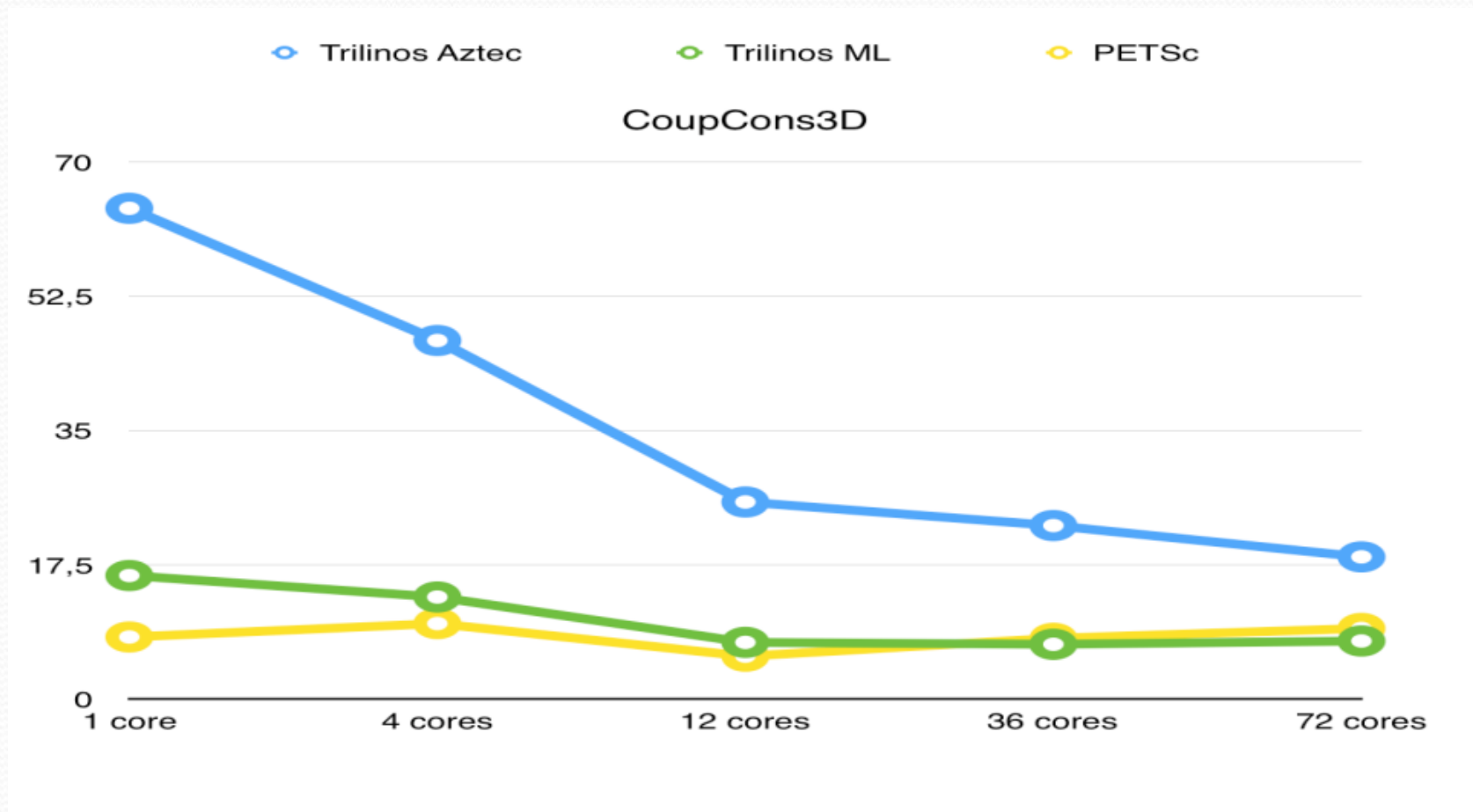
Задача «ML_Laplace»



Задача «Transport»



Задача «CoupCons3D»



Модуль составления и решения систем линейных уравнений

- Удобный функционал для составления матрицы, вектора и решения системы,
- Позволяет составлять матрицы без априорной информации о шаблоне разреженности,
- Имеются собственные линейные решатели основанные на ILU₂ разложении, а также разложении с выбором ведущего элемента,
- Может вызывать линейные решатели из внешних пакетов PETSc, Trilinos и др.
- + Разрабатывается собственный решатель на основе ILU₂ для MPI+OpenMP реализации

INMOST: дальнейшее развитие

- + механизм работы с динамически измельчаемыми сетками произвольного вида,
- + дополнительные сеточные примитивы для измельчения и разгрубления сеток,
- + собственные методы балансировки сетки,
- + новые линейные решатели,
- + добавим отчет о сравнении линейных решателей в рамках INMOST на матрицах из флоридской коллекции.

Заключение: INMOST поддерживается и развивается

- Программная платформа INMOST развивается как инструмент для упрощения параллелизации приложений: ее применение позволяет легко перейти к параллельной реализации программы.
- На основе платформы INMOST работают:
 - GeRa – геофильтрация и геомиграция радионуклидов;
 - Floctree – течение жидкостей со свободной поверхностью;
 - INM black-oil simulator.
- Планируется поддержка и дальнейшее развитие INMOST.

Трудности разработчиков INMOST

- Недостаток времени чтобы сделать все задуманное
- Недостаток внешних пользователей

Все это можете помочь сделать ВЫ

Литература

- Василевский Ю.В., Коньшин И.Н., Копытов Г.В., Терехов К.М., INMOST – программная платформа и графическая среда для разработки параллельных численных моделей на сетках общего вида, Москва: Изд-во Московского университета, 2013, 144 с.
- INMOST – a toolkit for distributed mathematical modeling. URL: <http://www.inmost.org>
- INMOST... // Proceedings of Russian Supercomputing Days 2015, Pp. 96–103, 104-109 (2 доклада).
- INMOST... // Proceedings of Russian Supercomputing Days 2016, Pp. 133-139, 288-293, 543-555 (3 доклада).