



Платформа INMOST: функционал для распределенного математического моделирования

Кирилл Терехов^{1,2,3,4}, Руслан Янбарисов^{1,3,4}

¹Институт Вычислительной Математики им. Г.И. Марчука Российской Академии Наук

²Московский Физико-Технический Институт

³Сеченовский университет

⁴Университет Сириус

CFD-Weekend, 9 декабря 2023



Платформа INMOST

INMOST (www.inmost.org, www.inmost.ru) это аббревиатура:

Integrated	Интегрированные	<ul style="list-style-type: none">• Распределенные сетки<ul style="list-style-type: none">• подвижные• адаптивные• Сборка распределенных СЛАУ• Параллельное решение СЛАУ• Автоматическое дифференцирование• Сборка нелинейных систем• Совмещение неизвестных и моделей• Дискретизации: МКЭ, МКО
Numerical	Объектно-ориентированные	
Modelling and	Суперкомпьютерные	
Object-oriented	Технологии	
Supercomputing	Численного	
Technologies	Моделирования	

Первая версия появилась в 2012 году во время стажировки в Exxon-Mobil

Разработчики: Кирилл Терехов, Кирилл Никитин, Александр Данилов, Иван Капырин, Алексей Чернышенко (ИВМ РАН, ИБРАЭ РАН), Игорь Коньшин, Игорь Капорин (ВЦ РАН) Дмитрий Багаев, Андрей Бурачковский (МГУ), Руслан Янбарисов, Алексей Лёгкий, Сергей Петров, Иван Бутаков (МФТИ), Тимур Гарипов, Павел Томин, Кристина Майер (Стэнфорд), Акмад Абушаика (НВКУ), Лонглонг Ли (ИМ КАН), и др.



Востребованность

Пользователи:

- **ИВМ РАН** - в нашей группе (Юрия Василевского), кардио-электрофизиология совместно с **НИИ Механики МГУ**, в группе геофизиков (Николая Яковлева)
- **ИБРАЭ РАН** – лаборатория Ивана Капырина, код GeRa (коммерческий код для захоронения ядерных отходов и гидрологии)
- **НОЦ Газпромнефть-НГУ** – группа Сергея Головина, задачи авто-ГРП, **курс лекций по INMOST (<https://boogie.inm.ras.ru/INMOST-DEV/INMOST-lectures>)**
- **Стэнфорд**, США – группа Хамди Челепи, встроен в код AD-GPRS (дискретизации)
- **НВКУ**, Qatar – группа Ахмада Абушаики, код QASR, **расчет 3-х фазной модели нефти и газа на 1 млрд ячеек и 10 тысячах ядрах**
- **ТУ Дельфт**, Голландия – группа Дениса Воскова (дискретизации)
- **ИМ КАН**, Китай – Лонглонг Ли

Использовалось в проектах с:

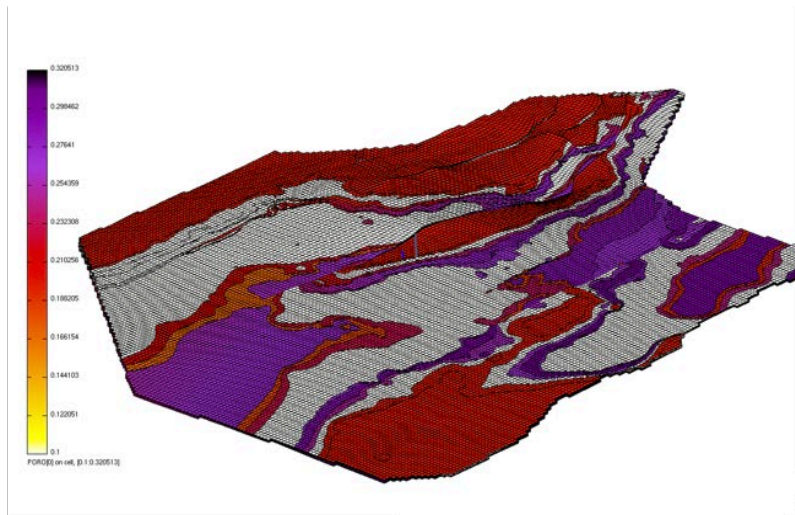
Total, Chevron, Storengy, INPEX – в **Стэнфорде**,
Exxon-Mobil, Роснефть, Samsung, Saudi Aramco – at **ИВМ РАН**,
Росатом – в **ИБРАЭ РАН**.



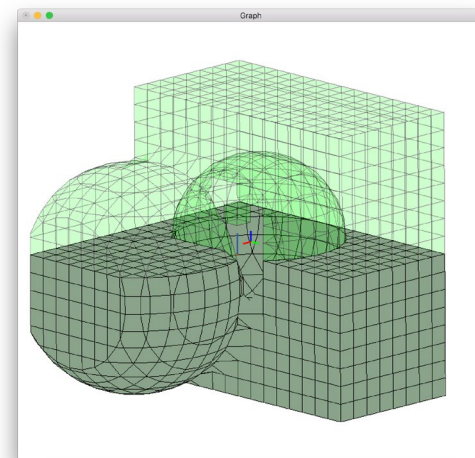
Расчетные сетки



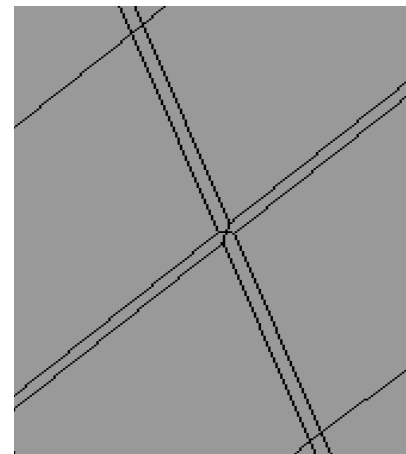
Модель человеческого тела



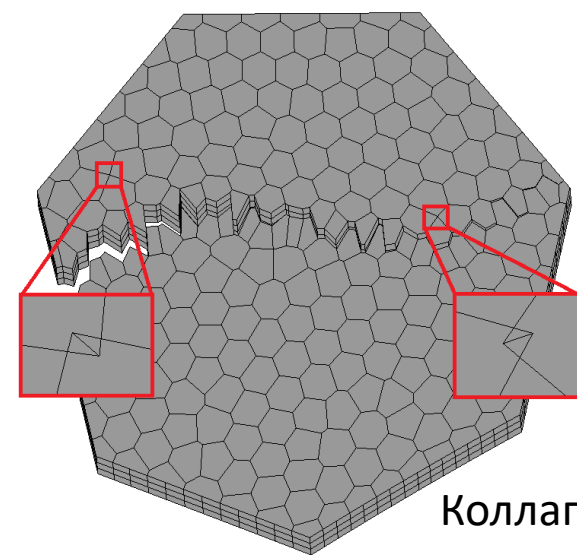
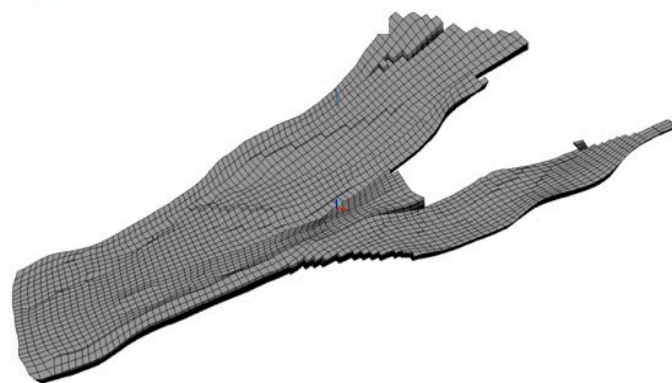
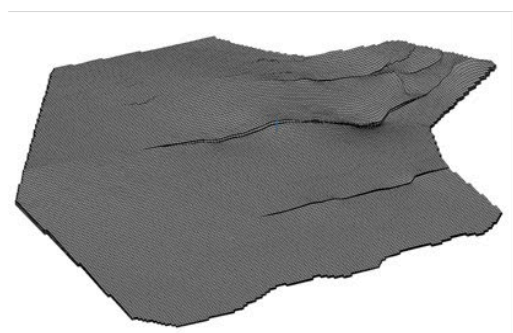
Геологические сетки с выклиниванием, поддержка входных данных коммерческих симуляторов нефти и газа



Сложные модификации



Вскрытие трещин



Коллапс ребер



Расчетные сетки

Поддержка полного набора **элементов**:
ячеек, граней, ребер, узлов.

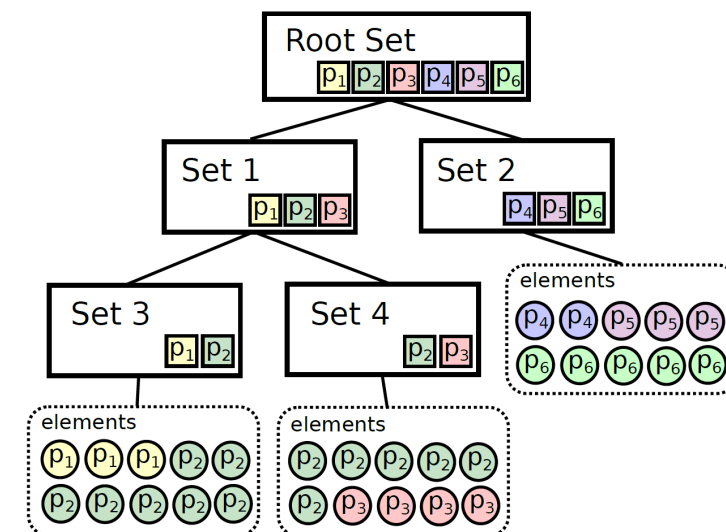
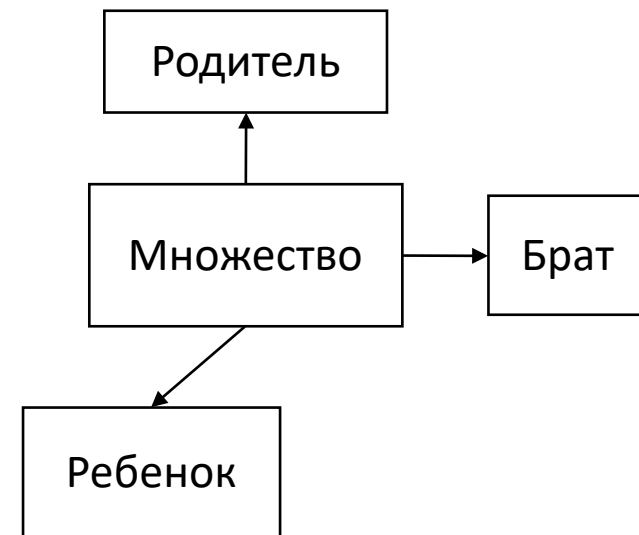
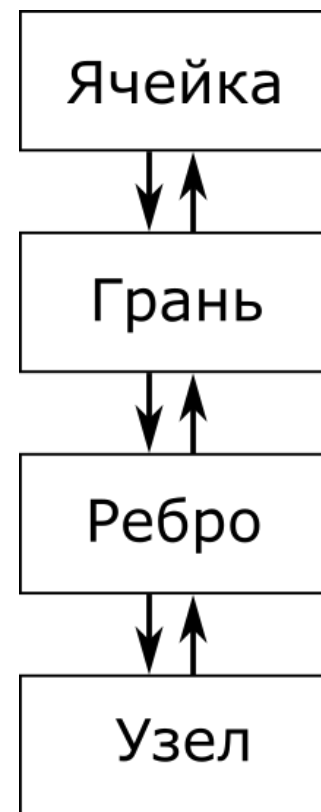
Расчет **геометрических данных**:

объем, площадь, нормаль, центр масс,
исправление ориентации.

Контроль топологической корректности:

вырожденность, замкнутость,
конформность, выпуклость, плоскость,
звёздность и т.п.

Задание распределенных **множеств**
элементов и организация множеств в
иерархию.





Декомпозиция области

Методы декомпозиции области:

внешние: ParMetis, Zoltan,

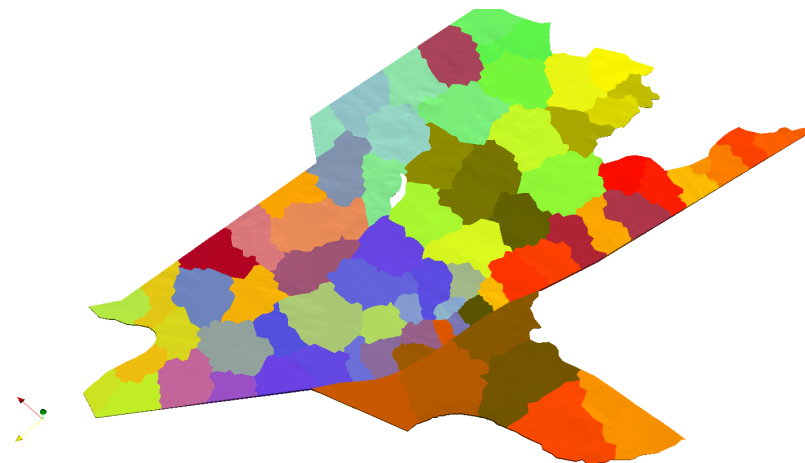
встроенные: упорядочивание Cuthill-McKee, метод K-средних.

Сеточный функционал:

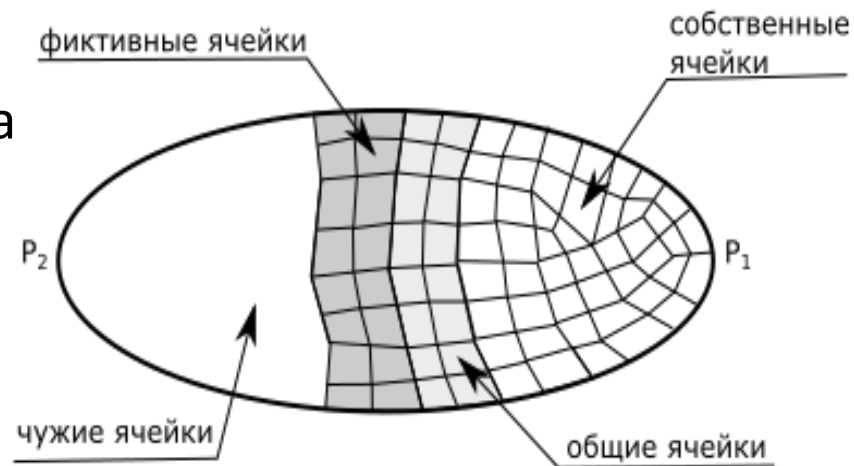
миграция элементов сетки для **декомпозиции** и **балансировки**,

любое количество слоев перекрытия между сетками на процессорах,

обмен сеточными данными: разреженные и плотно заданные, постоянной и переменной длины, действительные, целочисленные, бинарные, ссылки на элемент, значения с производными.



Пример декомпозиции области на 64 процессора



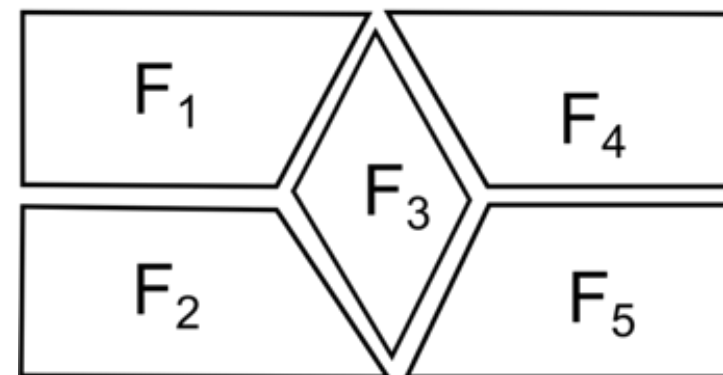
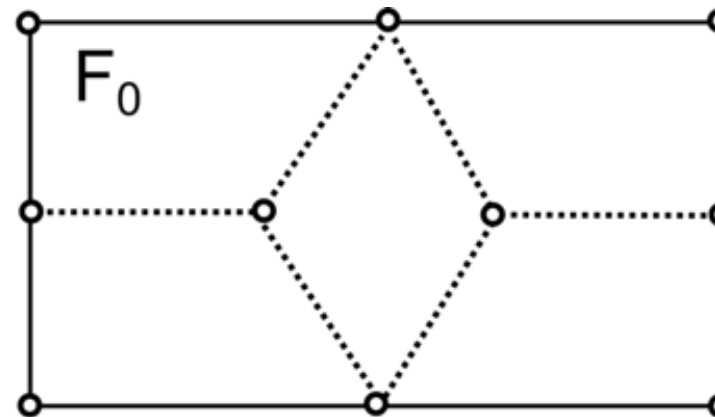


Модификация сеток

Можно отсоединять и **удалять** элементы,
а затем **создавать** новые

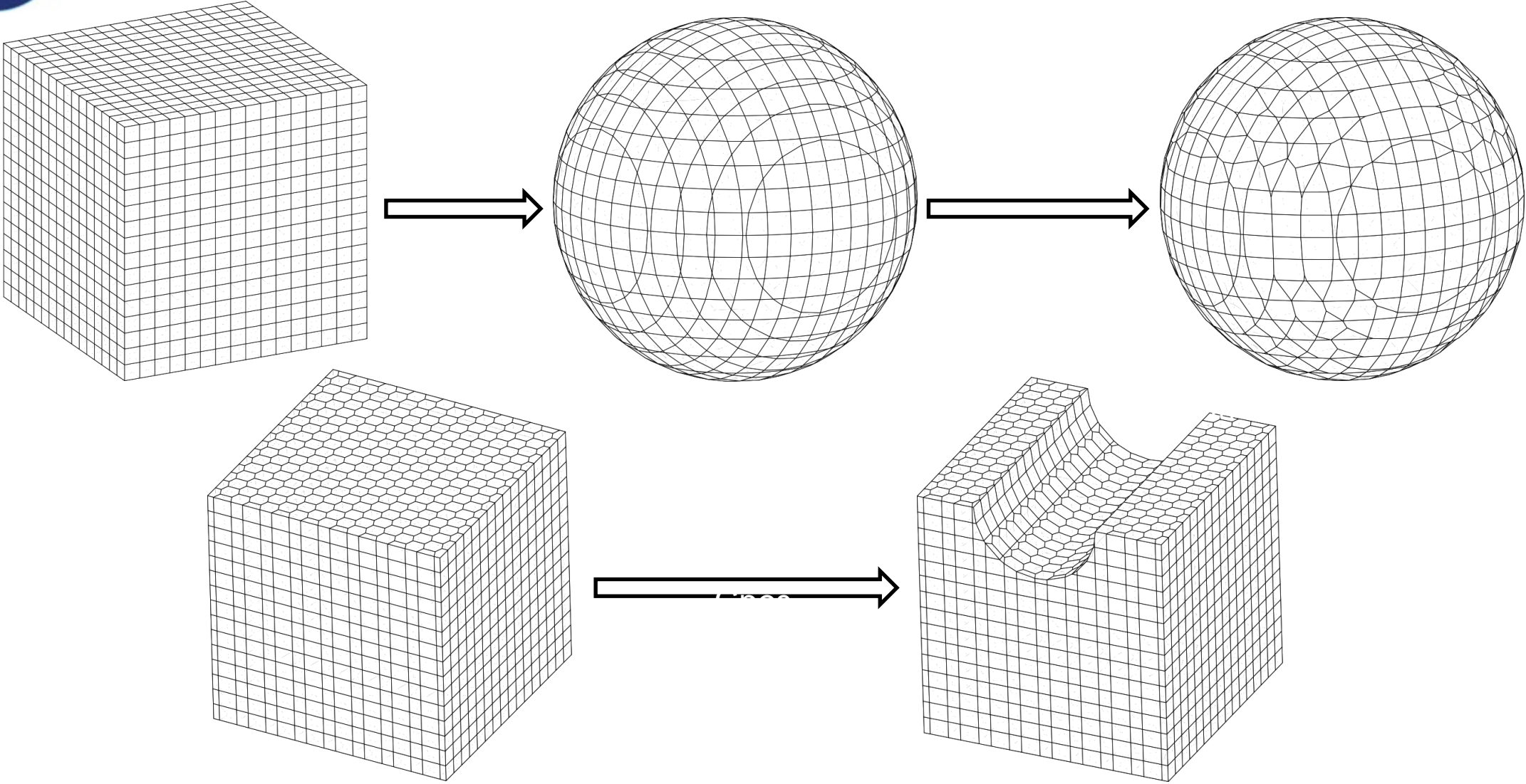
Вспомогательный функционал:

- **разделить** ребро по узлам,
- **разделить** грань по ребрам,
- **разделить** ячейку по граням,
- **схлопывание** ребра,
- **объединить** элементы.





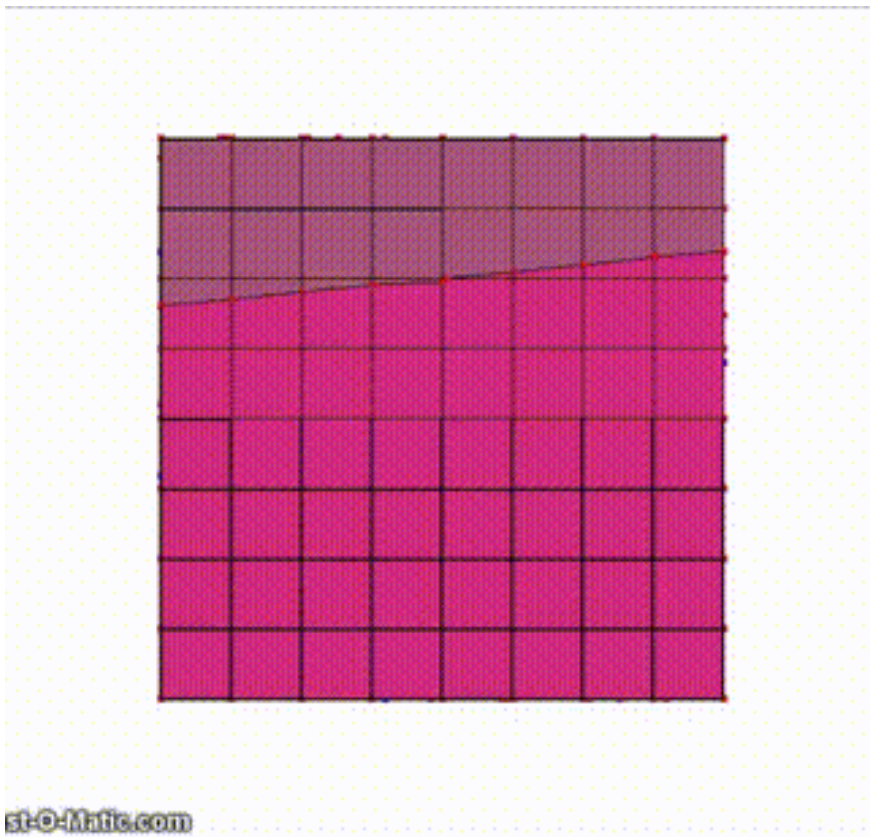
Модификация сеток



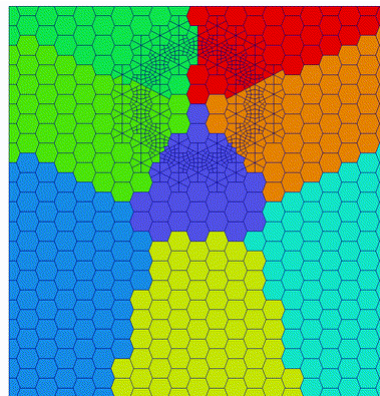
(<http://github.com/INMOST-DEV/INMOST-GridTools>)



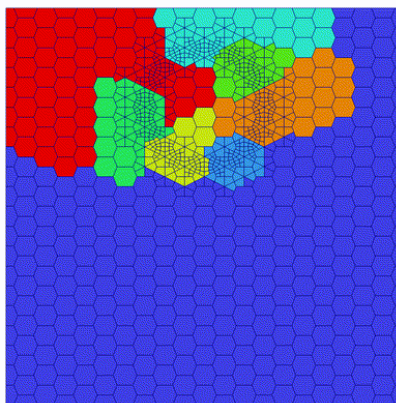
Динамические сетки



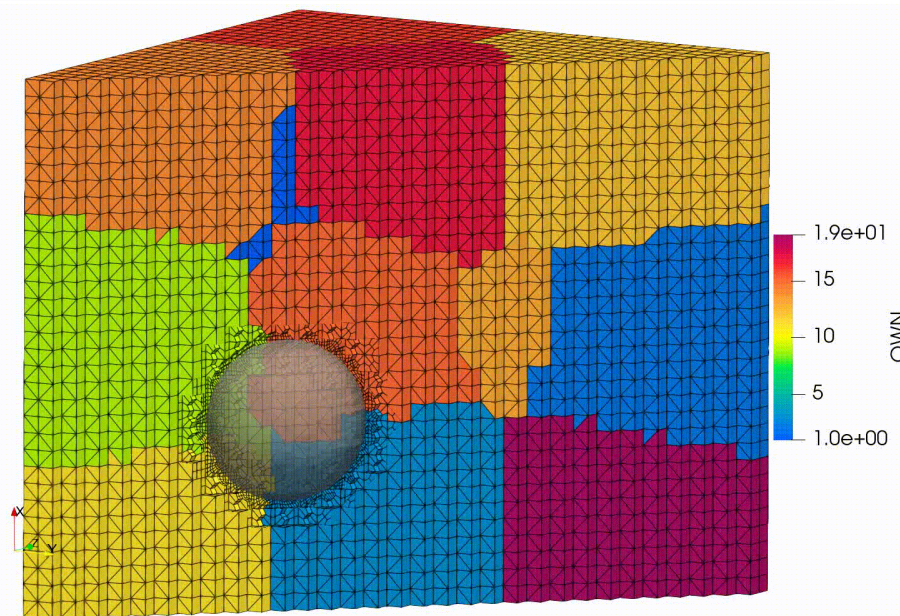
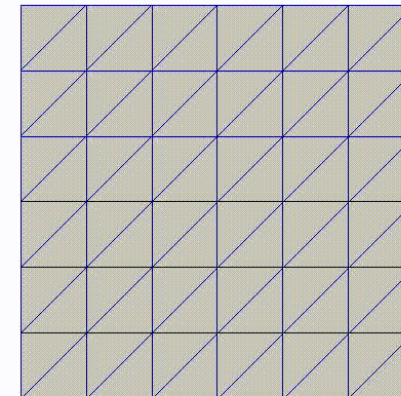
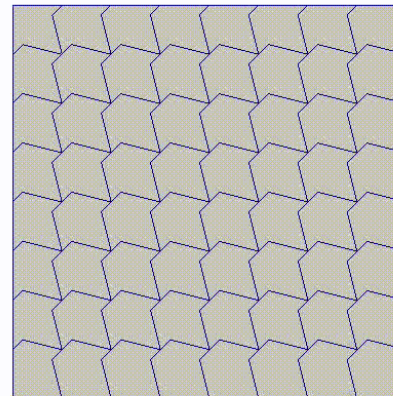
Пример **OctreeCutcell** в репозитории INMOST-Graphics



Пример **AdaptiveMesh** для адаптации сеток общего вида



Parmetis_AdaptiveRepart



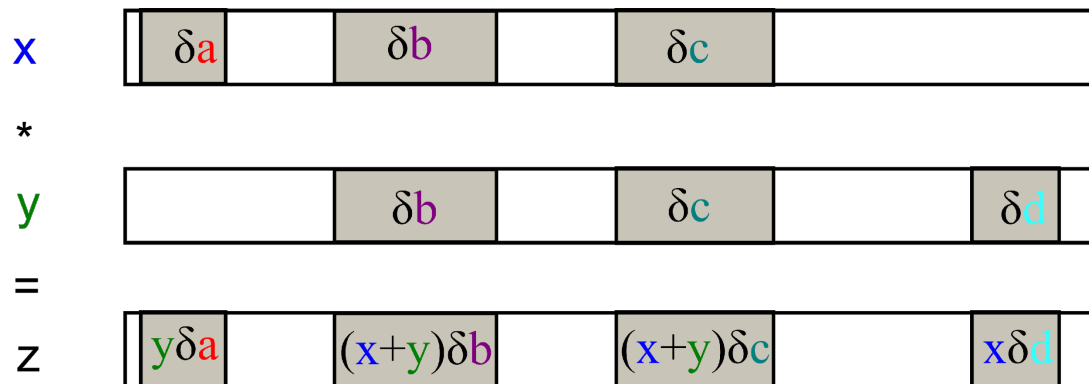


Автоматическое дифференцирование

Позволяет одним кодом
получить:

- невязку,
- **Якобиан,**
- **Гессиан.**

Очень **полезно** для **сложных**
нелинейных задач.



$$\mathbf{x}\{\partial a + \partial b + \partial c\} * \mathbf{y}\{\partial b + \partial c + \partial d\} = \mathbf{x} * \mathbf{y}\{y\partial a + (x+y)\partial b + (x+y)\partial c + x\partial d\}$$

Аддитивные операции с разреженными векторами: sparse AXPY



Автоматическое дифференцирование

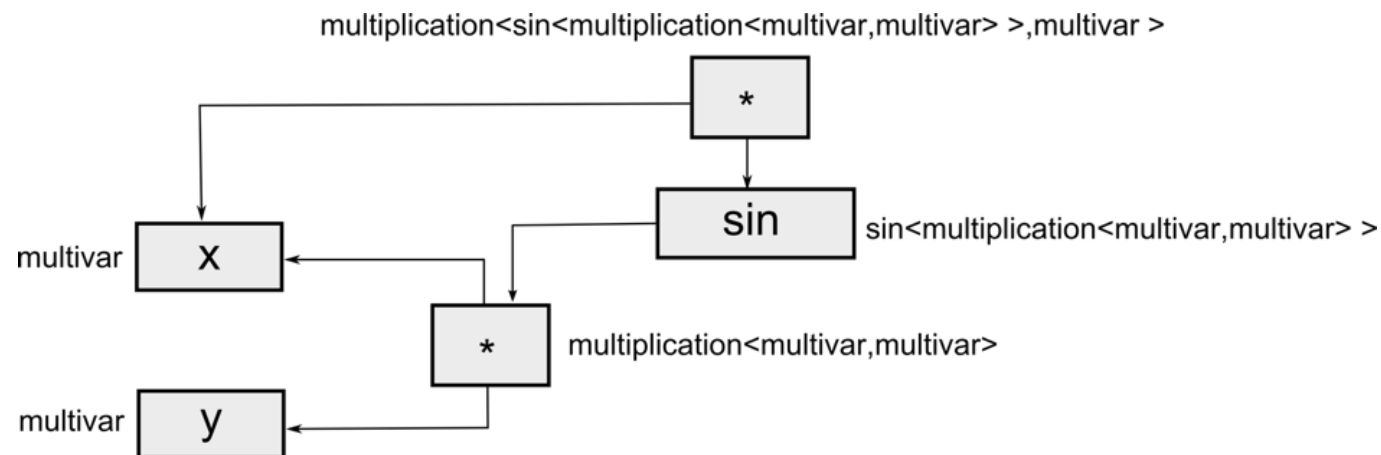
Реализовано посредством шаблонных выражений в C++.

Большая часть кода формируется и оптимизируется на этапе компиляции.

Поддерживает матрично-векторные операции, подмножество функционала **BLAS-LAPACK** в стиле **Eigen**.

Простота использования.

```
variable x, y, z;  
...  
z = x*sin(x*y)
```



внутреннее представление выражения $x*\sin(x*y)$

```
yield = Yield<variable>(stress);  
for (int k = 0; k < 6; ++k) dyield[k] = yield.GetDerivative(k);  
Cp = C - 0.5 * dlambda * Cdyield.Transpose().Kronecker(Cdyield);
```



Решение линейных систем

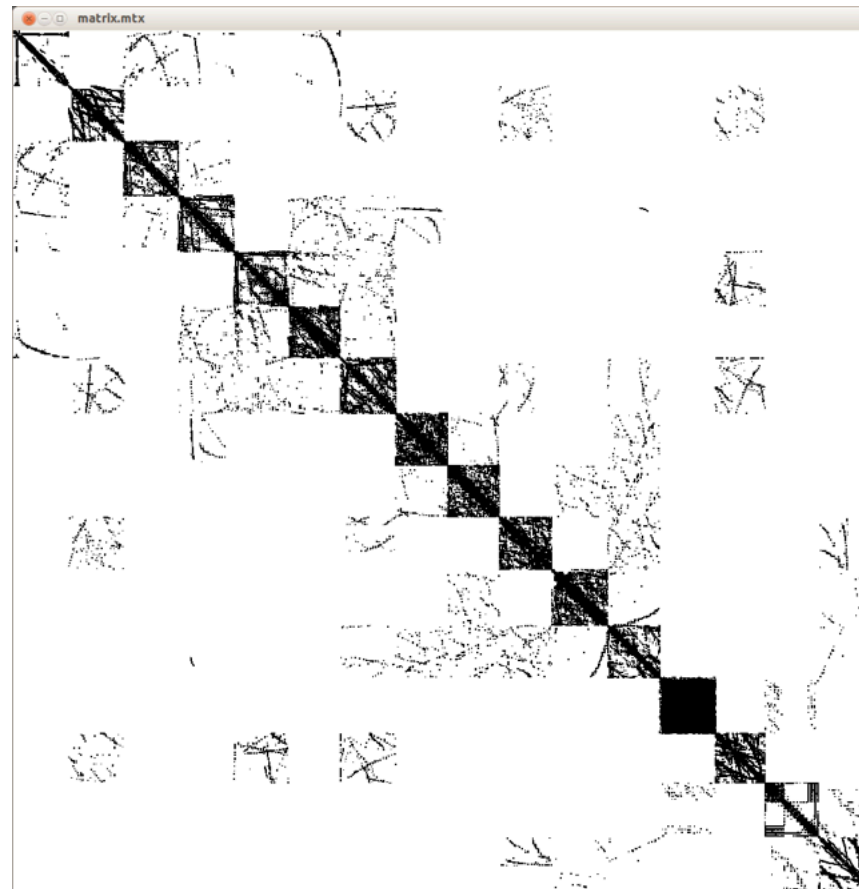
Простые структуры для сборки распределенных систем линейных уравнений.

Параллельные методы решения:

внешние PETSc, Trilinos, SuperLU, Hypre,

встроенные:

- ILU(τ, τ^2) и Crout-ILU(τ, τ^2) второго порядка,
- максимизация произведения на диагонали,
- масштабирование Синкхорна или I-доминирование,
- динамический подбор τ по числу обусловленности LU,
- многоуровневое вычисление дополнения по Шуру,
- откладывание факторизации с малым диагональным элементом или по числу обусловленности LU,
- параллельные исключения на основе k-направленной диссекции, многослойный аддитивный метод Шварца.





Методы решения СЛАУ

- Метод **BiCGStab(I)**¹ с переобуславливателем.
- **MPI-распараллеливание** на основе аддитивного метода Шварца
- **OpenMP-распараллеливание** на основе дважды-окаймленной блочно-диагональной формы^{9,10}
- Многоуровневый **предобуславливатель** на основе метода неполной факторизации Краута второго порядка^{2,3}
- Оценка обусловленности обратных факторов определяет **грубую систему** и подстраивает параметры отбрасывания^{4,5}
- Масштабирование и переупорядочивание локальных систем на каждом уровне^{6,7,8}



Ссылки на литературу

- 1) Sleijpen, G.L.G., Diederik R. F.: *BiCGstab(l) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum*. *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 1.11 (1993): 2000. **(Метод Крылова)**
- 2) Li N., Saad Y., Chow E.: *Crout versions of ILU for general sparse matrices*. *SIAM Journal on Scientific Computing* 25.2 (2003): 716-728. **(неполная факторизация Краута)**
- 3) Kaporin, I.E.: *High quality preconditioning of a general symmetric positive definite matrix based on its UTU+ UTR+ RTU-decomposition*. *Numerical linear algebra with applications* 5.6 (1998): 483-509. **(неполная факторизация второго порядка)**
- 4) Bollhöfer, M.: *A robust ILU with pivoting based on monitoring the growth of the inverse factors*. *Linear Algebra and its Applications* 338.1-3 (2001): 201-218. **(подстройка параметров отбрасывания)**
- 5) Bollhöfer, M., Saad Y.: *Multilevel preconditioners constructed from inverse-based ILUs*. *SIAM Journal on Scientific Computing* 27.5 (2006): 1627-1650. **(вычисление грубой подсистемы)**
- 6) Cuthill, E., McKee J.: *Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices*. *Proceedings of the 1969 24th national conference*. 1969. **(переупорядочивание)**
- 7) Olschowka, M., Arnold N.: *A new pivoting strategy for Gaussian elimination*. *Linear Algebra and its Applications* 240 (1996): 131-151. **(масштабирование и переупорядочивание для максимизации диагонального произведения)**
- 8) Kaporin, I.E.: *Scaling, reordering, and diagonal pivoting in ILU preconditionings*. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling* 22.4 (2007): 341-375. **(масштабирование для уменьшения числа обусловленности)**
- 9) Grigori, L., Boman, E. G., Donfack, S., Davis, T. A.: *Hypergraph-based unsymmetric nested dissection ordering for sparse LU factorization*. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32.6 (2010): 3426-3446. **(блочно-диагональная форма)**
- 10) Duff, I. S., Scott, J. A.: *Stabilized bordered block diagonal forms for parallel sparse solvers*. *Parallel Computing*, 31.3-4 (2005): 275-289. **(блочно-диагональная форма)**



Мультифизика

Расщепление симулятора на отдельные **модели**

Модели соединяются через

функции: мобильность, плотность, пористость,

потоки: член Био, условие несжимаемости, капиллярное давление,

правую часть: реакции.

Возможно **управлять:**

моделями, неизвестными, функциями, связывающими соотношениями, сборкой невязки и якобиана.

Допускает **полностью неявное** решение.



Расщепление на модели в симуляторе резервуара

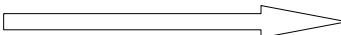


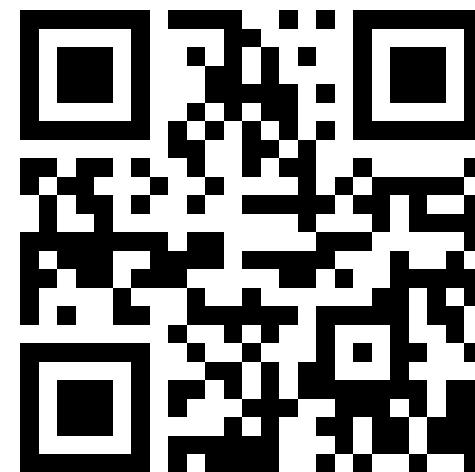
Ссылки на INMOST

Проект с **открытым** исходным **кодом** (BSD-лицензия)

- Управление посредством git: <https://github.com/INMOST-DEV/INMOST>
- Компиляция с помощью CMake
- Платформенно-независим
- Разработано множество примеров использования
- Разработан **учебный курс** по практическому использованию
- **INMOST** для реализации собственных численных моделей
- <https://boogie.inm.ras.ru/INMOST-DEV/INMOST-lectures>

Короткие адреса проекта:

- Заглавная страница проекта: <http://inmost.org> 
- Документация Doxygen: <http://doxy.inmost.org>
- Документация Wiki: <http://wiki.inmost.org>





Yuri Vassilevski
Kirill Terekhov
Kirill Nikitin
Ivan Kapyrin

Parallel Finite Volume Computation on General Meshes

 Springer



Мотивация

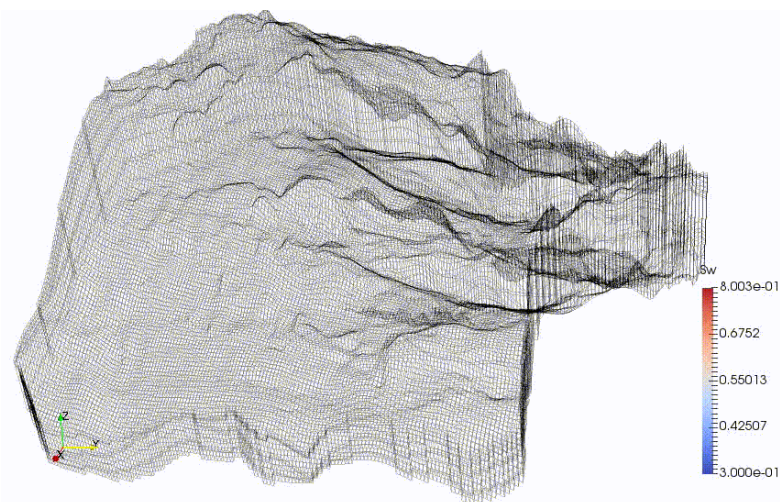
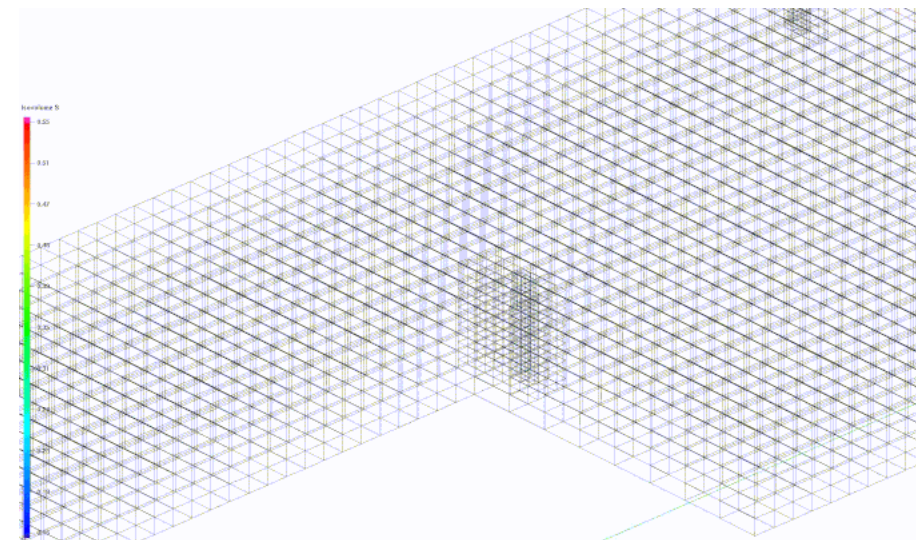
Задачи и приложения



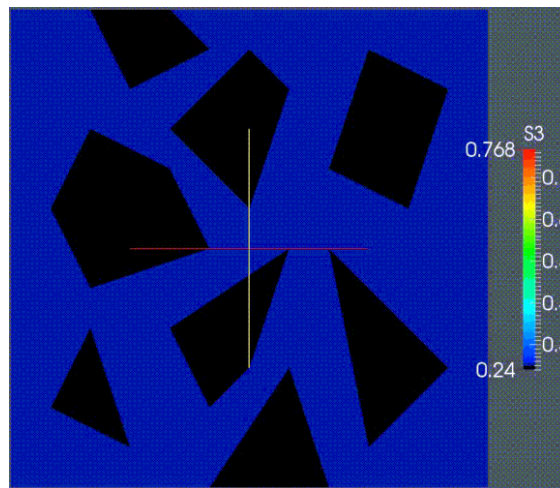
Нефть и Газ

Система:

$$\frac{\partial \rho_w \theta S_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_w \mathbb{K}(\nabla p - \rho_w g \nabla z)) = q_w$$
$$\frac{\partial \rho_o \theta S_o}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_o \mathbb{K}(\nabla p - \nabla P c_o - \rho_w g \nabla z)) = q_o$$
$$\frac{\partial \rho_g \theta (R S_o + S_g)}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_g \mathbb{K}(\nabla p - \nabla P c_g - \rho_g g \nabla z)) = q_g$$



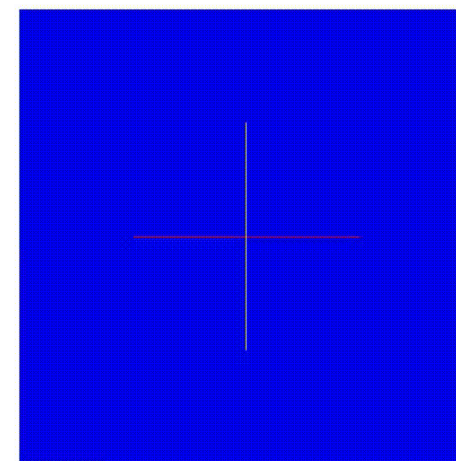
Сложная геология



Экстремальная анизотропия

(video slide)

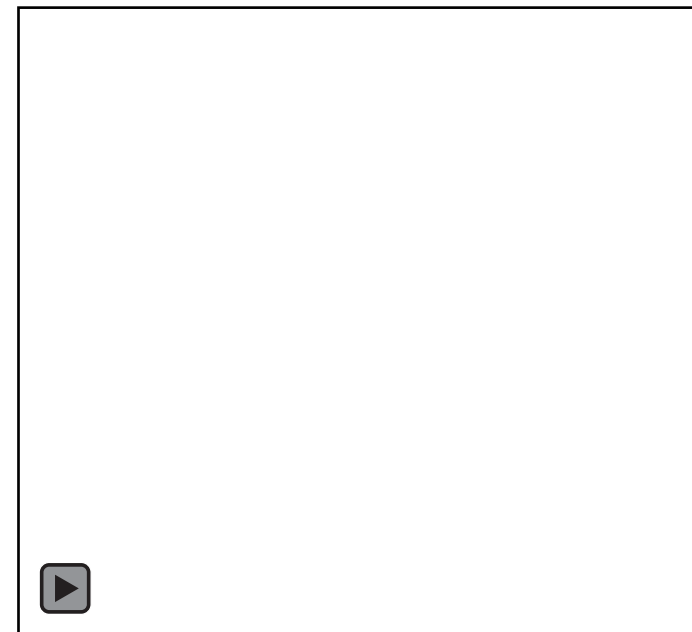
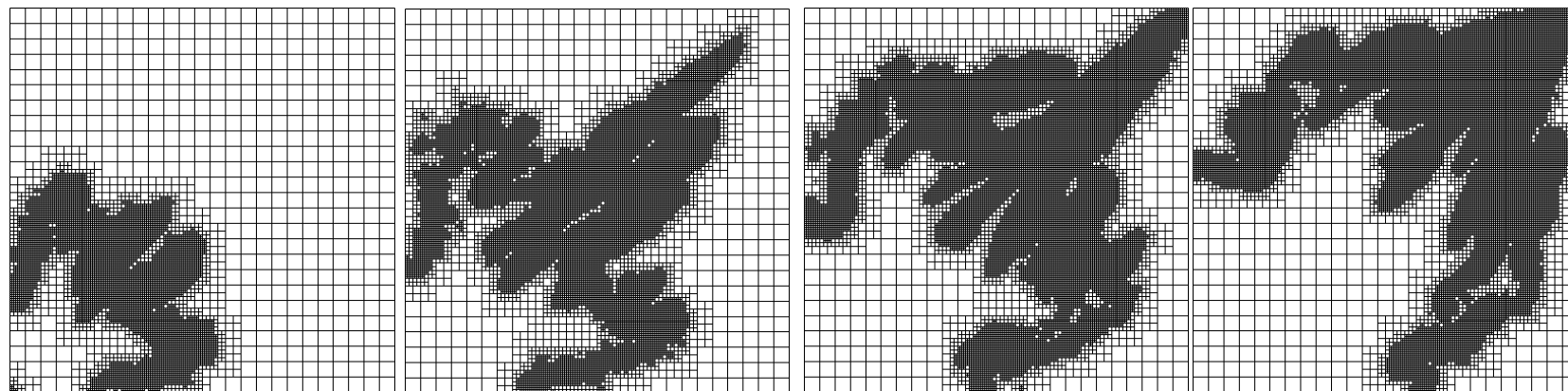
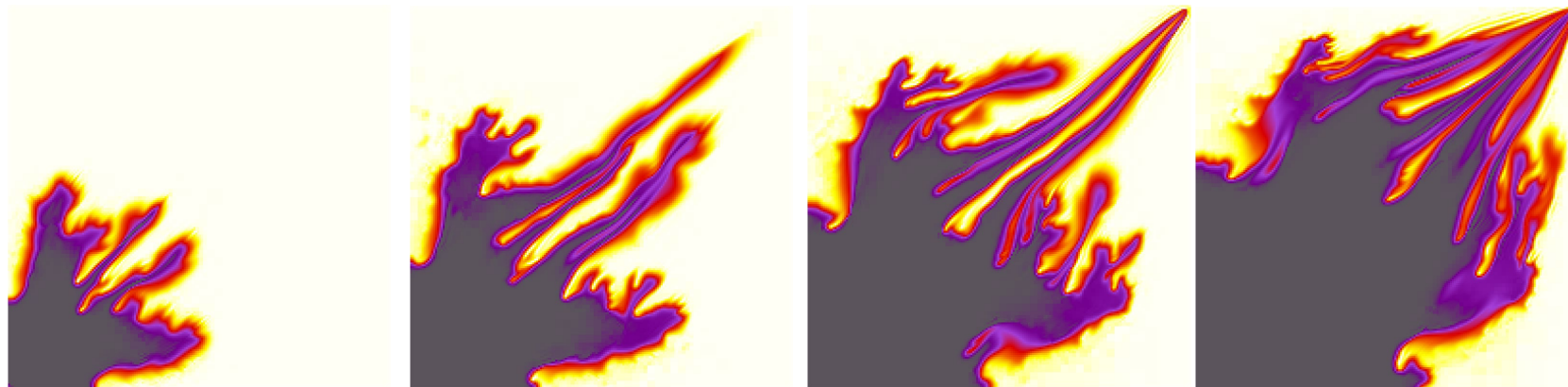
Адаптивные сетки



Трещины



Нефть и Газ

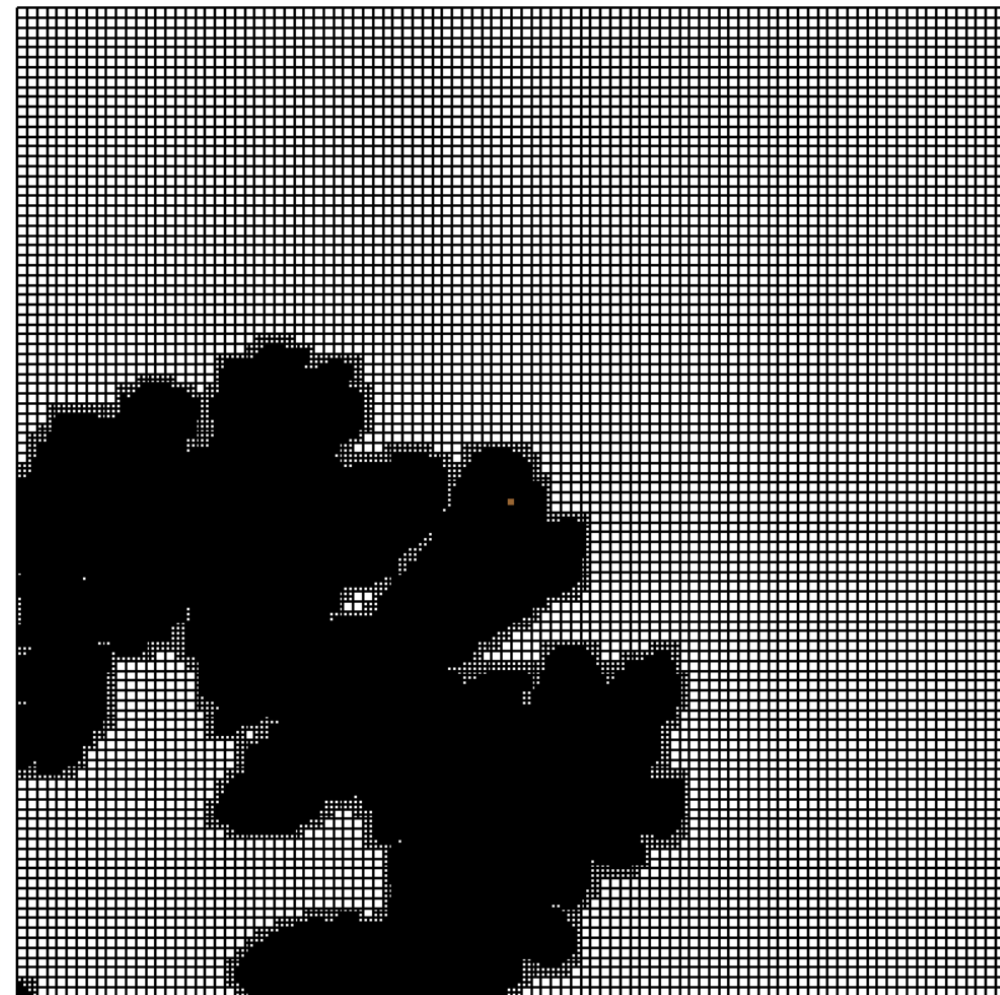
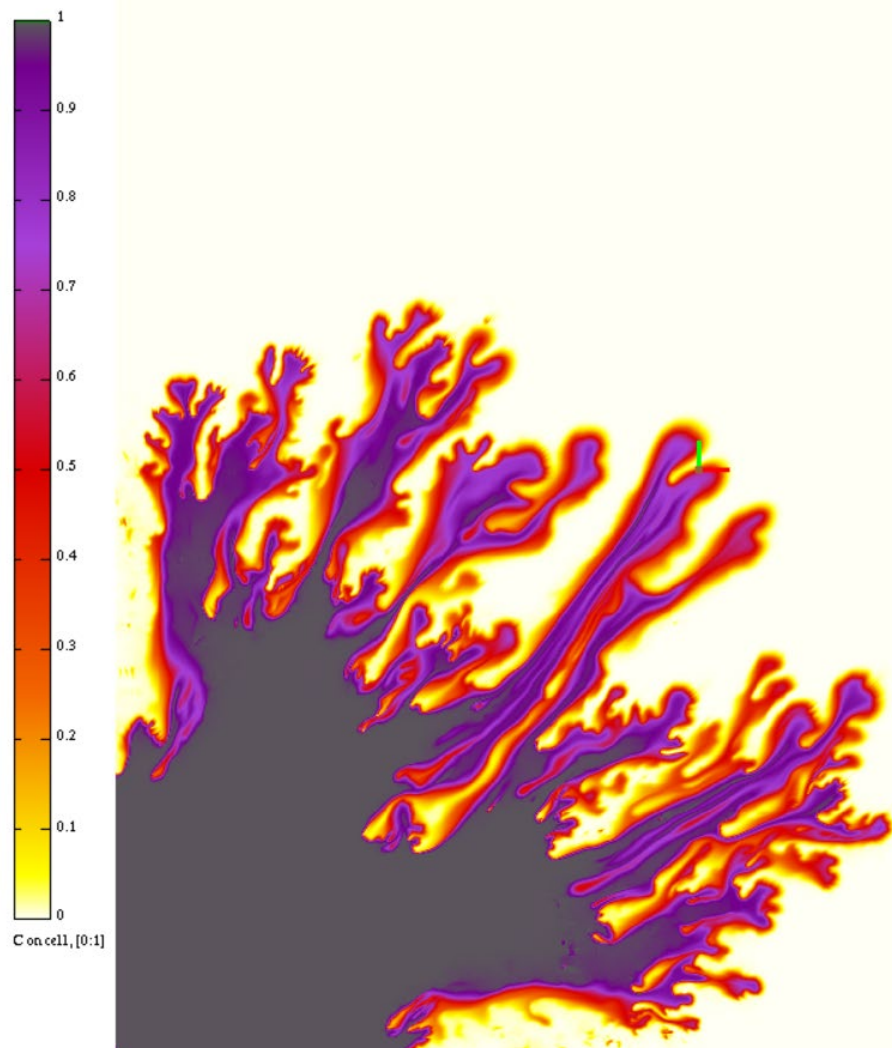


Трёхмерный расчет

(video slide)



Нефть и Газ: Ветвление

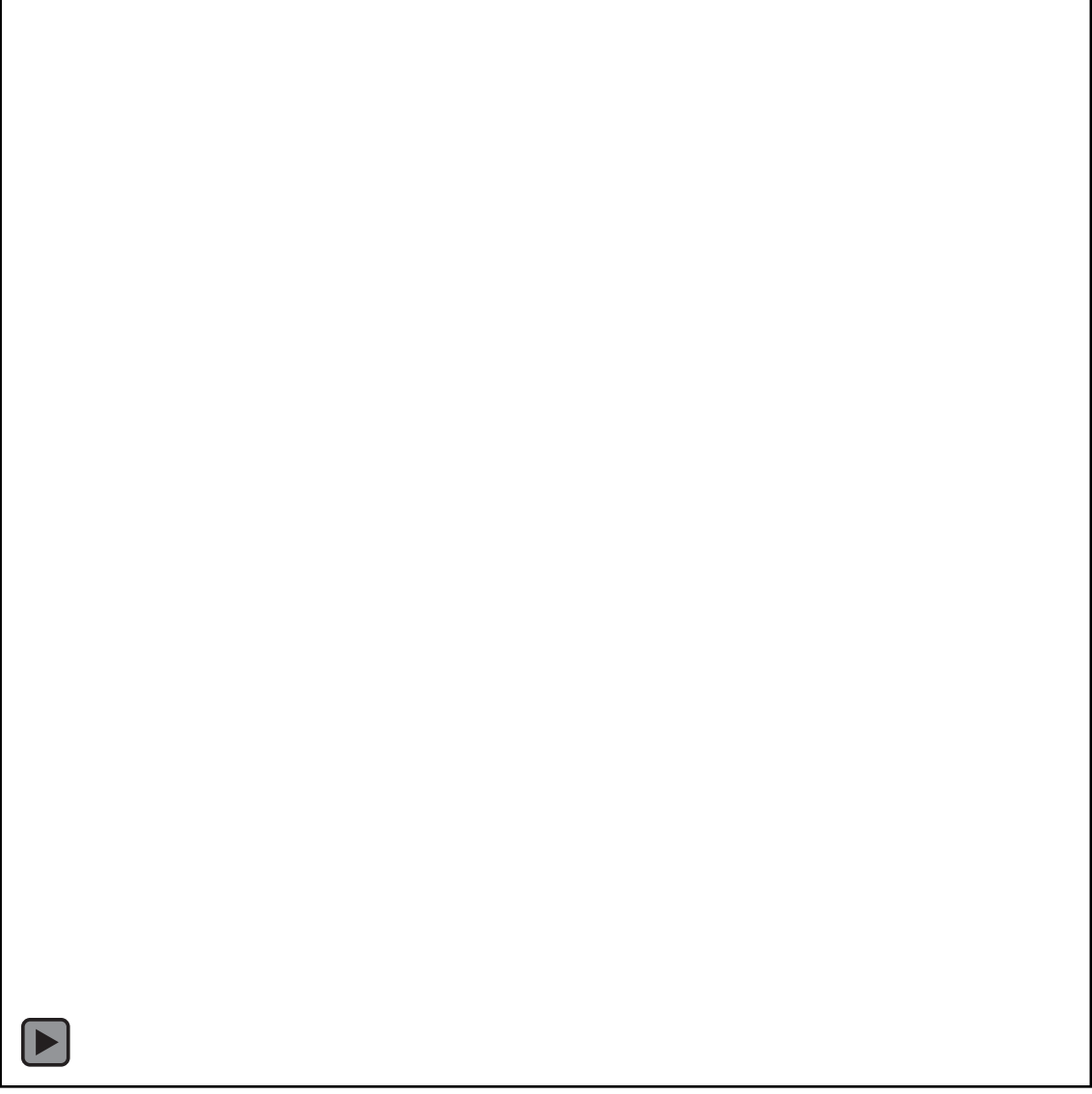
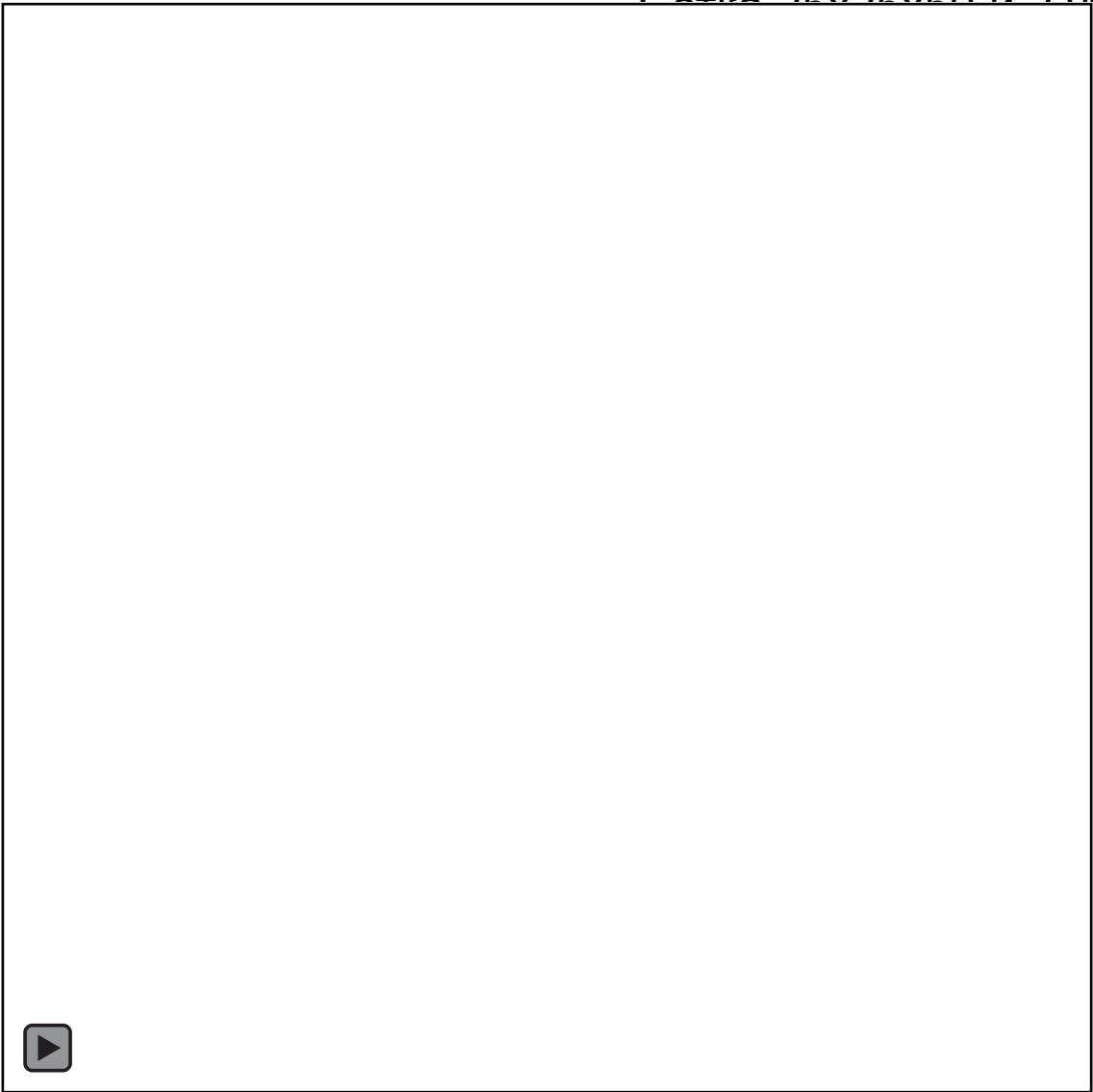


Сетка 100x100 и 4 уровня сгущения,
Параллельный расчет



Нефть и Газ: Ветвление

Сеть 25x25x50 и 2x100

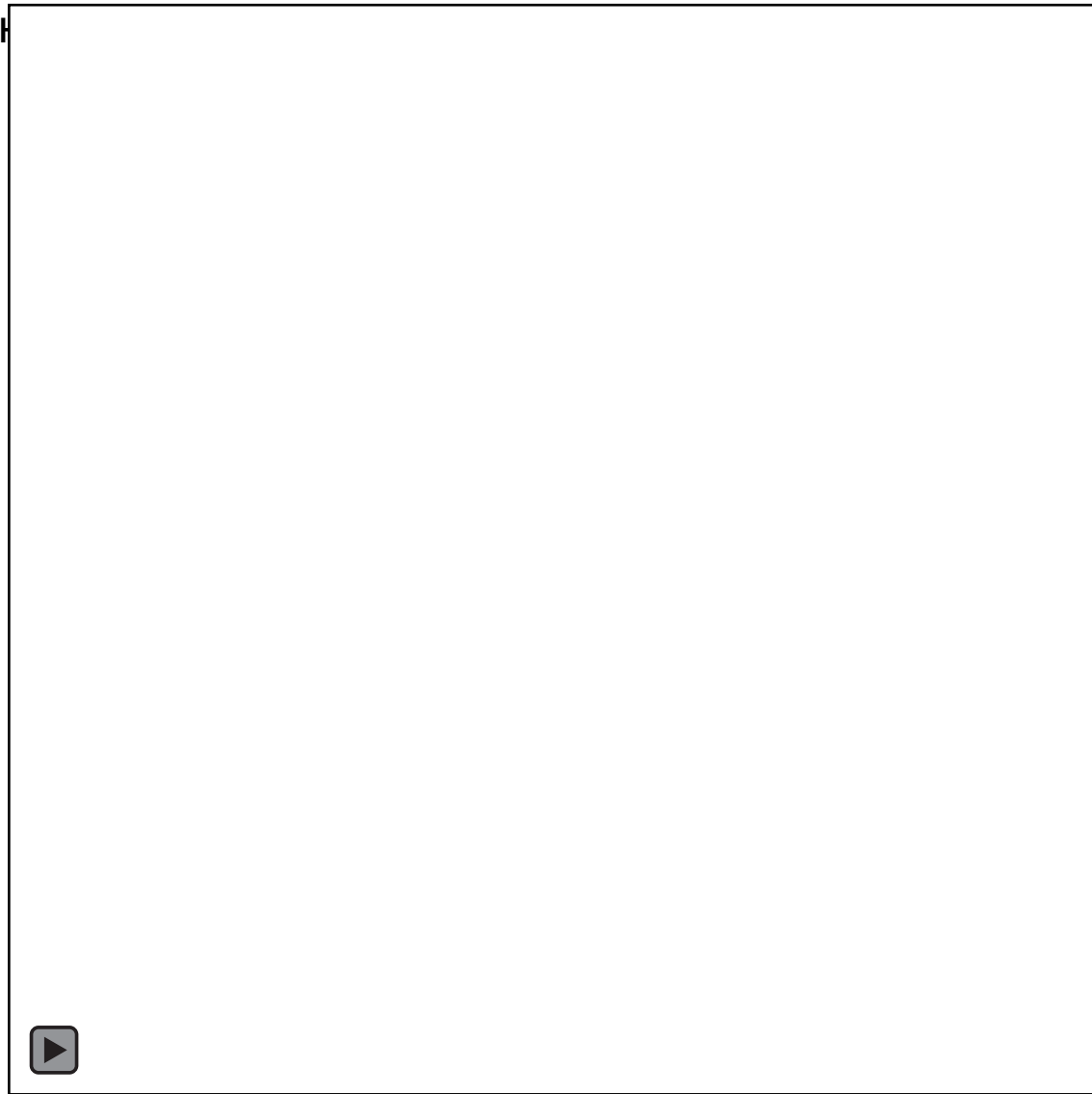
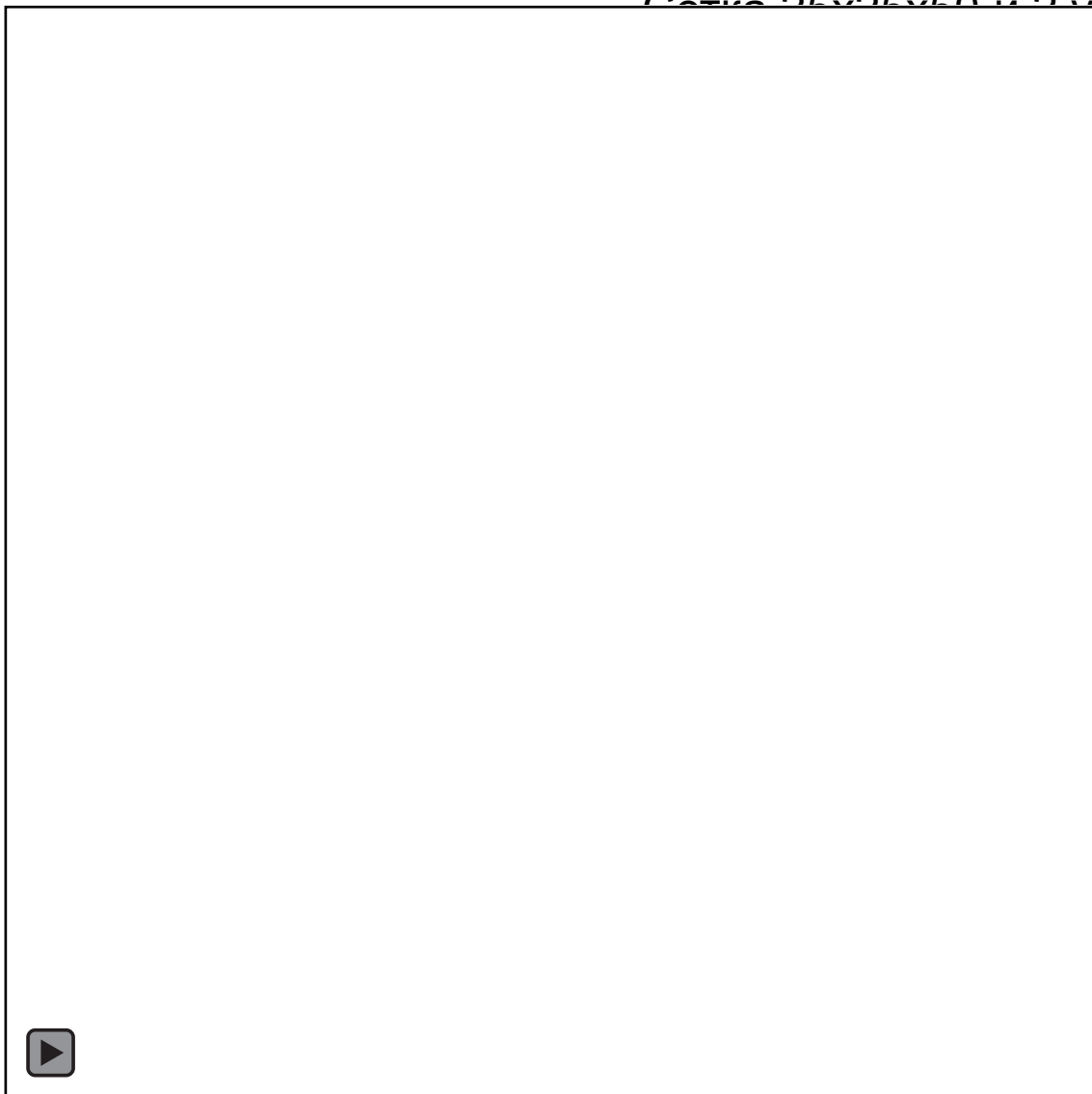


(video slide)



Нефть и Газ: Ветвление

Сеть 25x25x50 и 2x00В
Т



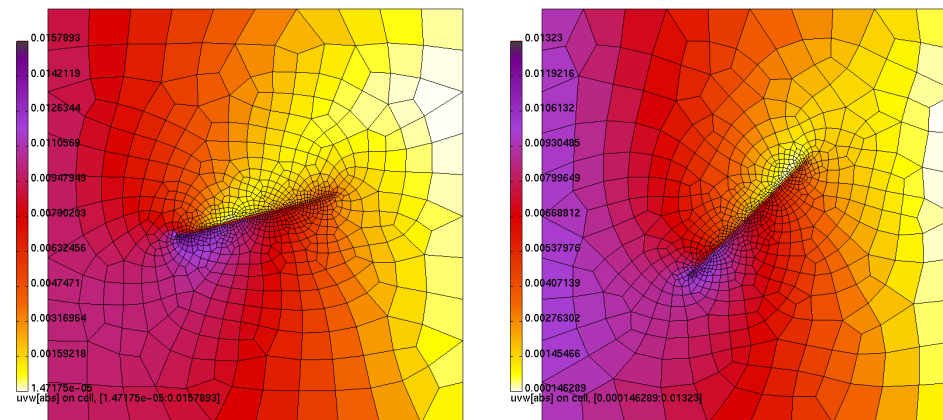
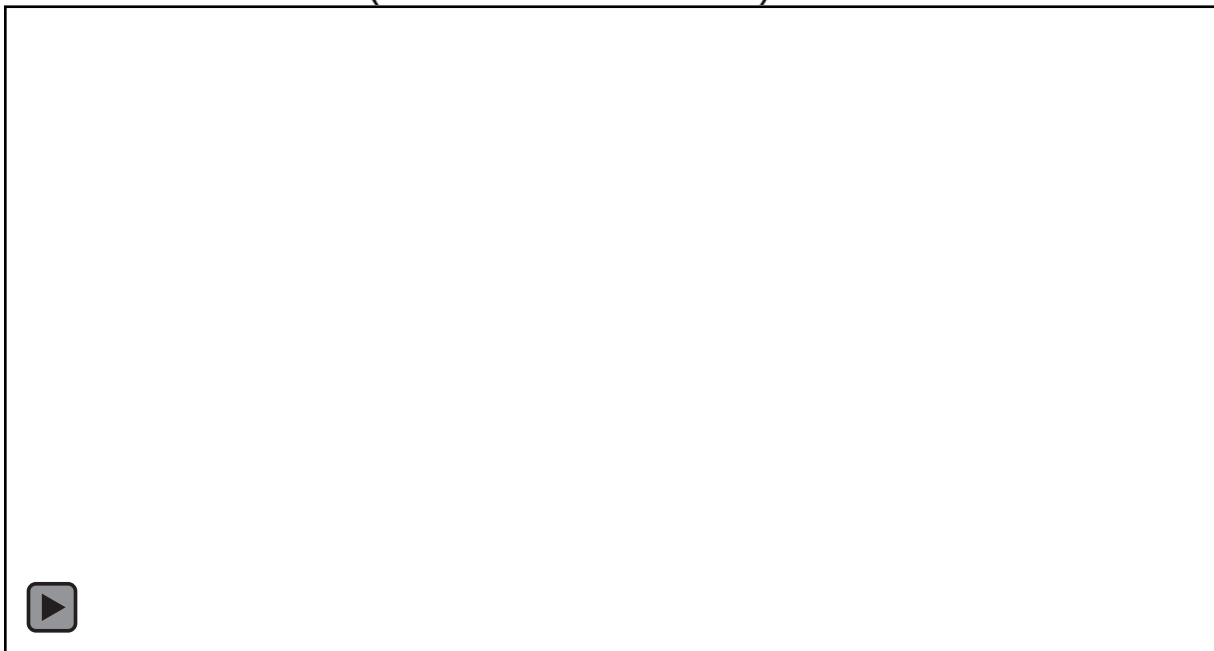
(video slide)



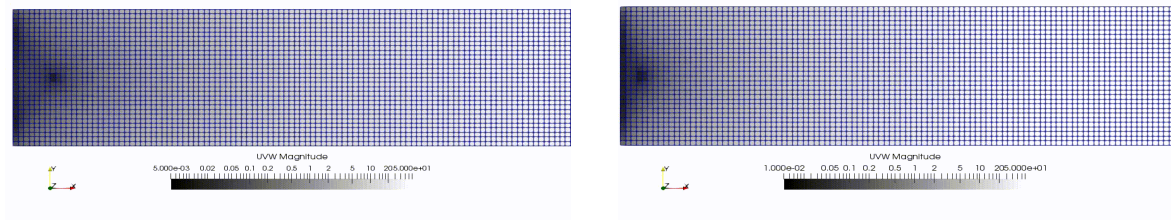
Нефть и газ: пороупругость

- Система:

$$\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\mathbb{K}(\nabla p - \rho g \nabla z) - \mathbb{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) = q$$
$$- \operatorname{div} \left(\boldsymbol{\varepsilon} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} + \mathbb{B} p \right) = \rho g \nabla z$$



Контактная механика с трением



Образование трещин

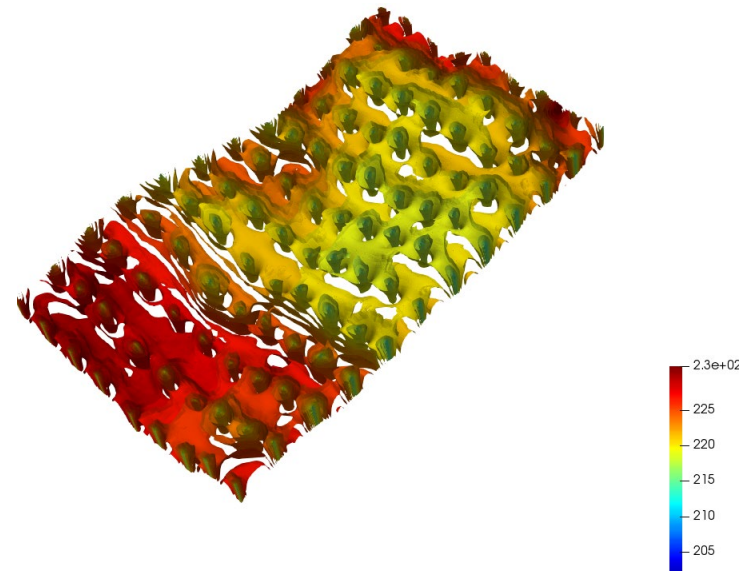
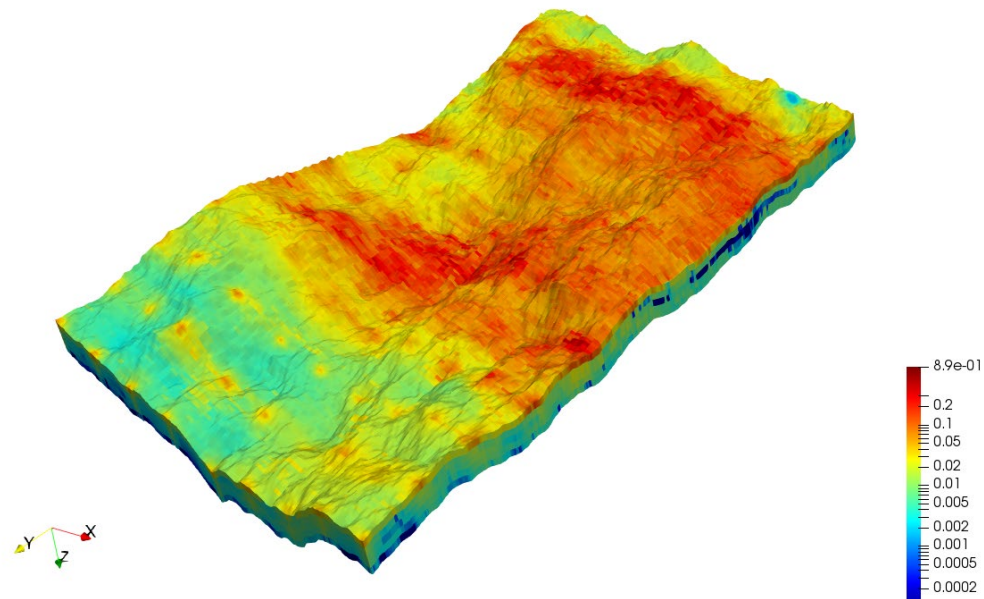


Нефть и газ

- Подходит для решения больших систем:
 - Задача черной нефти
 - **3** неизвестных на ячейку
 - **100M** и **200M** ячеек (320 ядер, кластер ИВМ РАН):

Case	T_{mat}	T_{prec}	T_{iter}	T_{sol}	T_{upd}	N_n	N_l
SPE10_100M	14	18.5	55.4	78.6	0.2	402	3.5
SPE10_200M	29.6	34.7	64.1	107.5	0.38	428	3.96

- Протестировано до **1 млрд ячеек** на 9600 ядрах Cray Ахмадом Абушаика в HBKU, Катар.
- В литературе: **Constrained pressure residual method with AMG**





Нефть и Газ: пороупругость

- Система:

$$\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\mathbb{K}(\nabla p - \rho g \nabla z) - \mathbb{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) = q$$

$$- \operatorname{div} \left(\varepsilon: \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} + \mathbb{B} p \right) = \rho g \nabla z$$

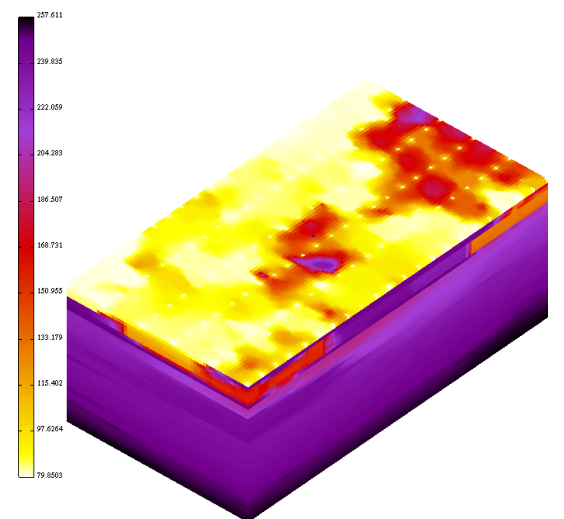
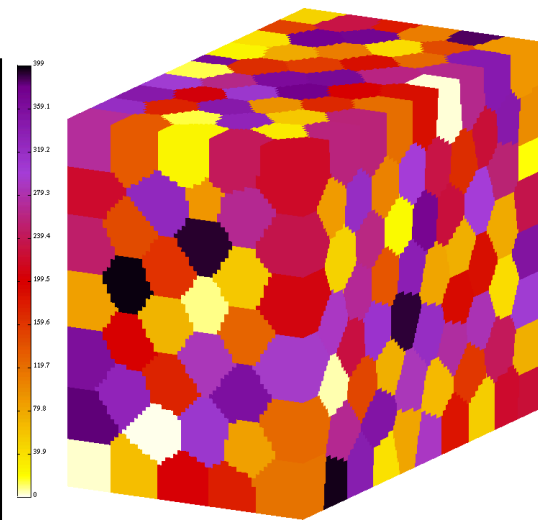


- 4 неизвестных на ячейку
- 1.2М ячеек (кластер ИВМ РАН, Ломоносов-2):

Machine	N_{proc}	T_{tot}	T_{asm}	T_{prec}	T_{iter}	T_{upd}
INM RAS cluster	100	15079.4	1119.8	7245.2	4463	479.7
	200	8791.2	582.9	3926.2	2800.9	252.4
	400	4637	300.3	1965.6	1374.2	127
Lomonosov supercomputer	700	3536	234.1	1071.1	1112.42	70.5

Решение **седловой** системы.

В литературе: **Fixed-stress splitting with AMG**



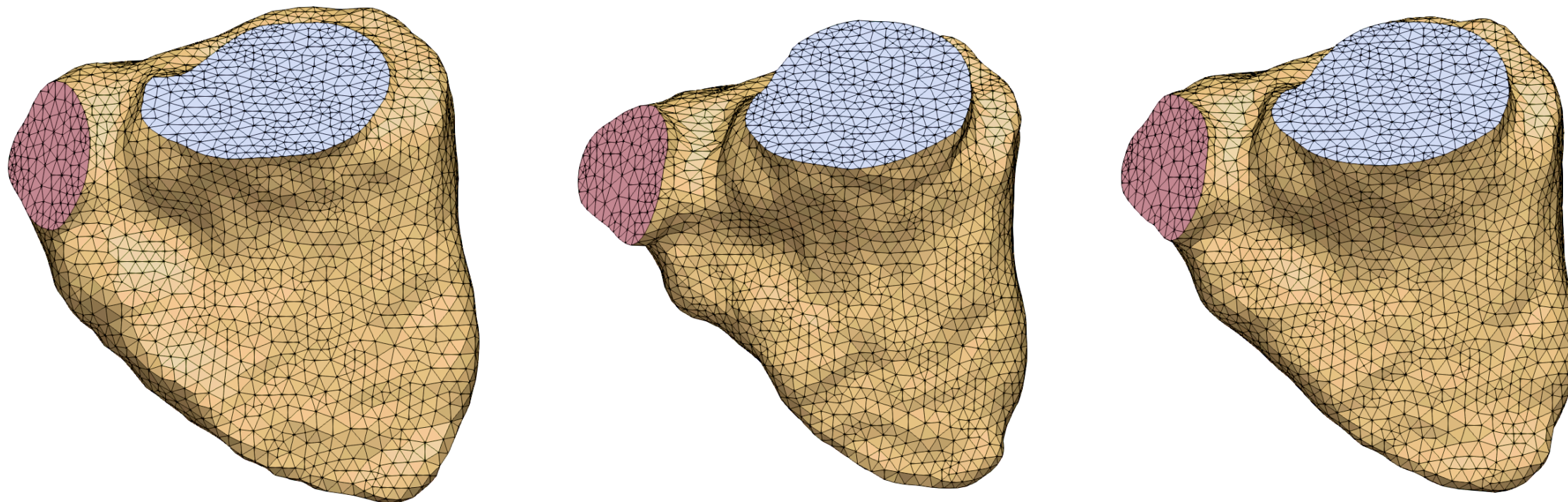


Течение крови в правом желудочке

Размеры области – 122 мм x 64 мм x 116 мм (начальный момент).

Плотность крови – $0.00106 \text{ г*мм}^{-3}$,

Вязкость крови – $0.0035 \text{ г*мм}^{-1}\text{*с}^{-1}$

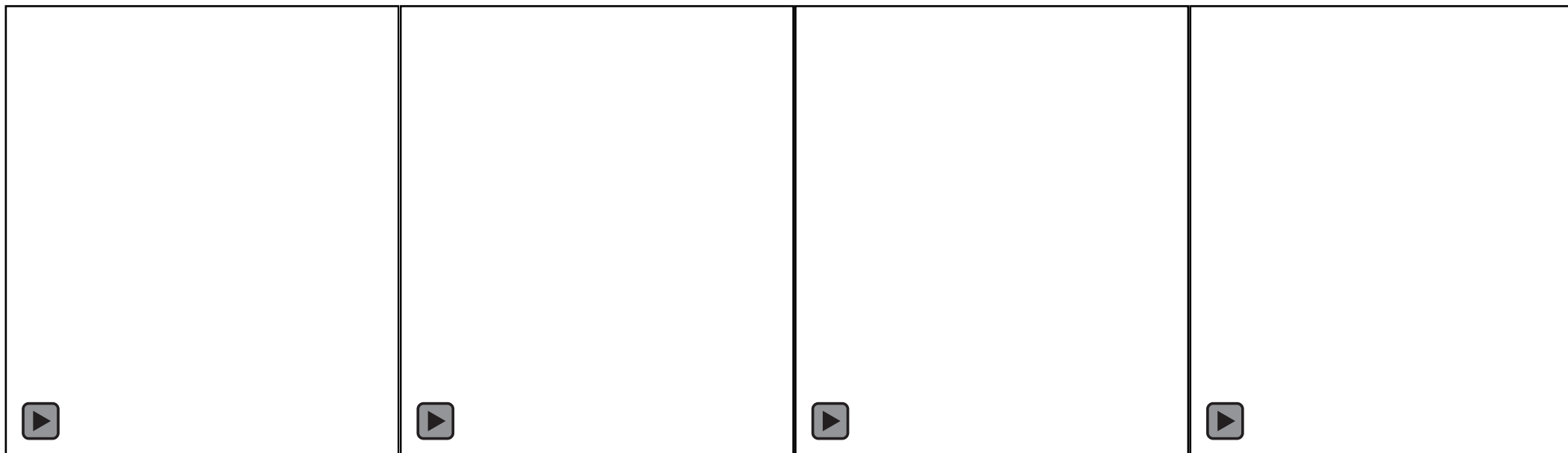


Сетка построена из сегментации последовательности снимков компьютерной томографии
(Александр Данилов, ИВМ РАН)



Течение крови в правом желудочке

- Параллельный расчет на 350 ядрах суперкомпьютера «Ломоносов-2»
- Особенность движения крови вызвана движением сетки и переключением клапанов



Модуль Скорости

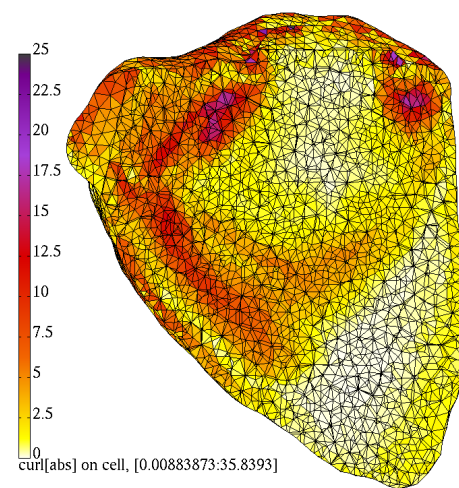
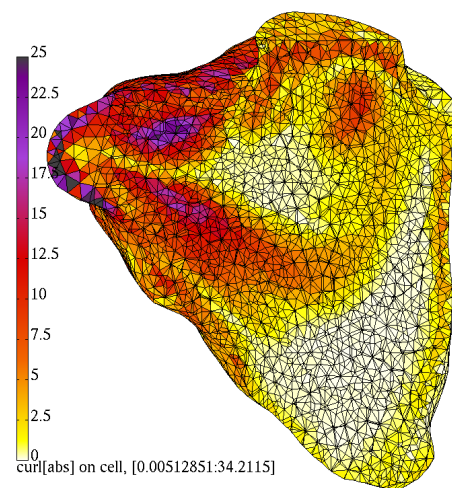
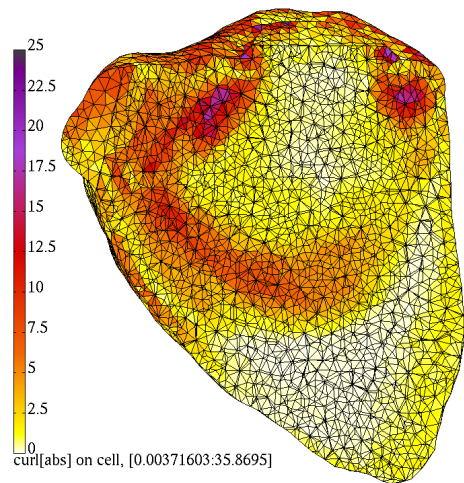
Давление

Модуль Завихренности

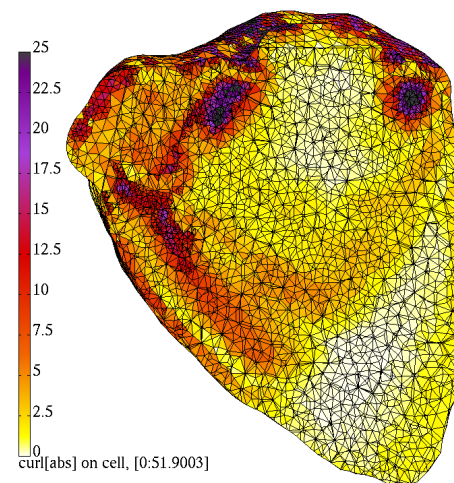
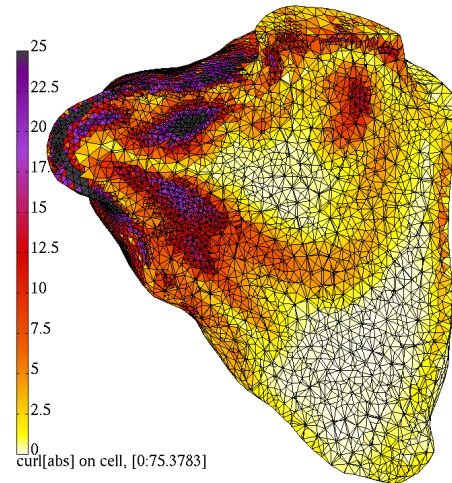
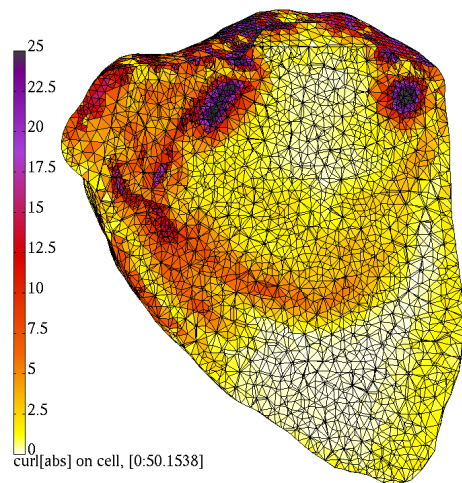
Распределение
по процессорам



Течение крови в правом желудочке



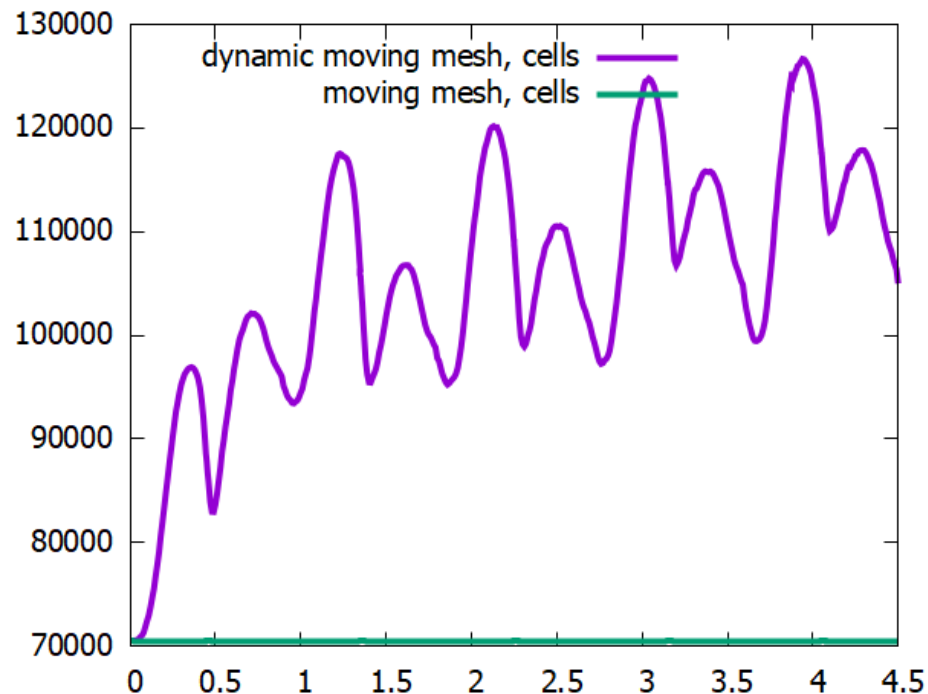
Завихренность
без адаптации
сетки



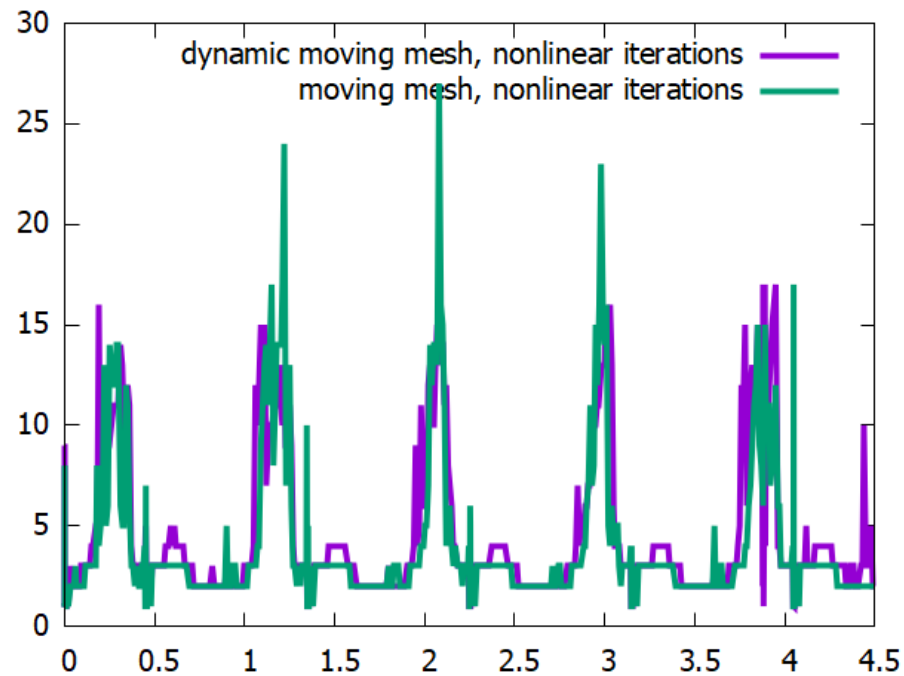
Завихренность
с адаптацией
сетки



Течение крови в правом желудочке



Изменение числа ячеек при адаптации



Число нелинейных итераций

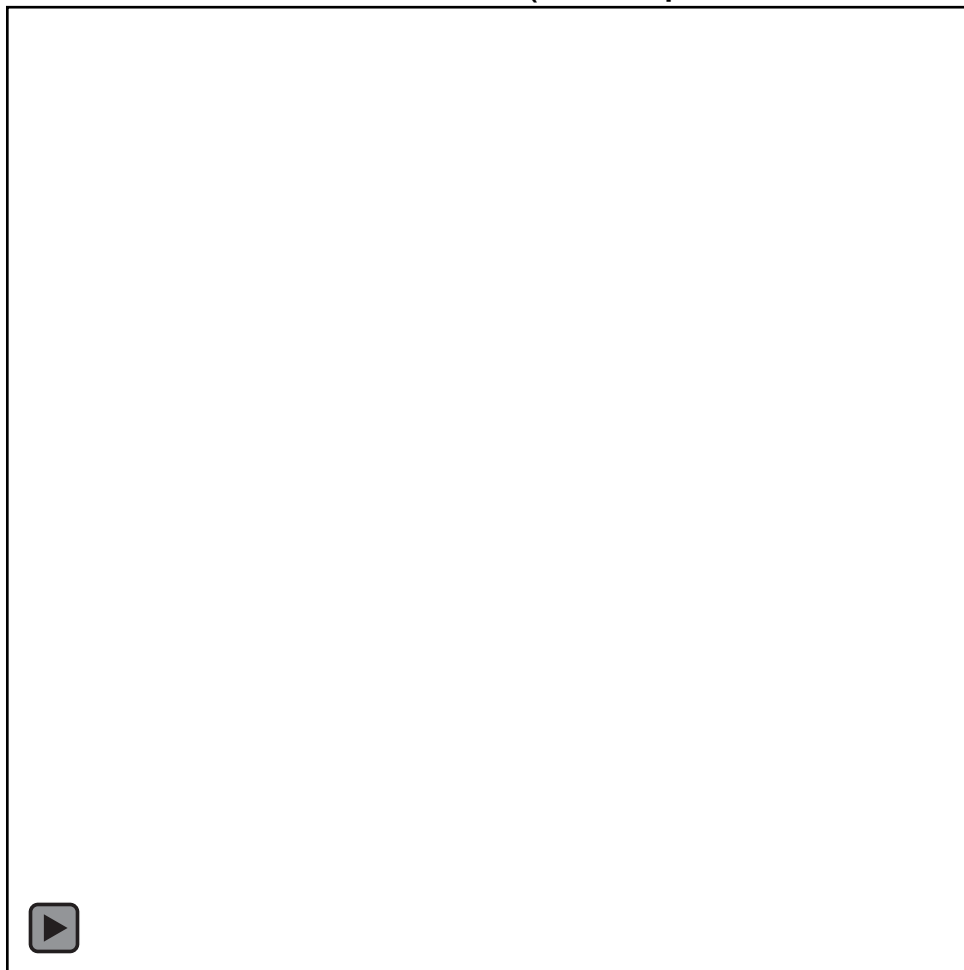
Рост числа нелинейных итераций при открытии и закрытии клапанов



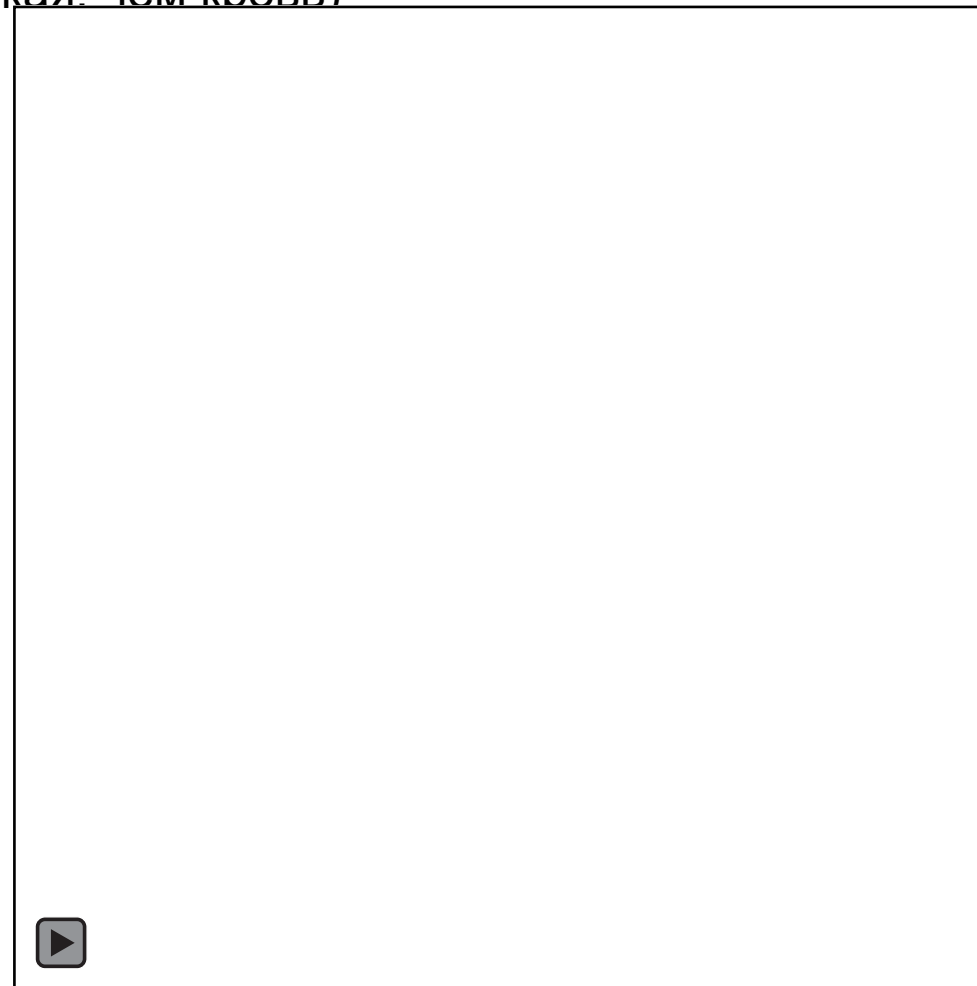
Подвижные динамические сетки

Плотность – $0.00105 \text{ г*мм}^{-3}$,

Вязкость – $0.000042 \text{ г*мм}^{-1}\text{*с}^{-1}$ (в сто раз менее вязкая, чем кровь)



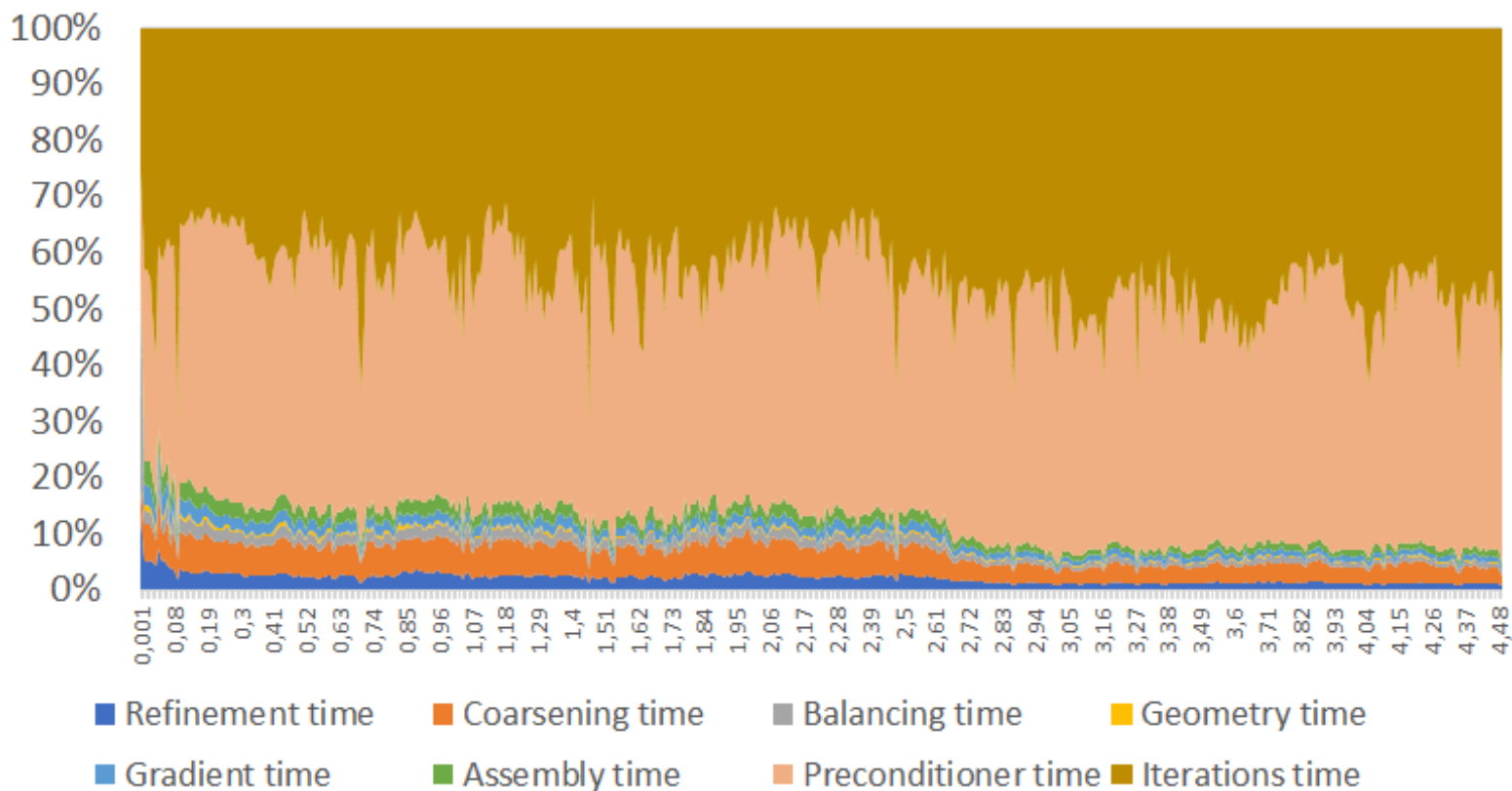
Сгущение к модулю завихренности



Сетка



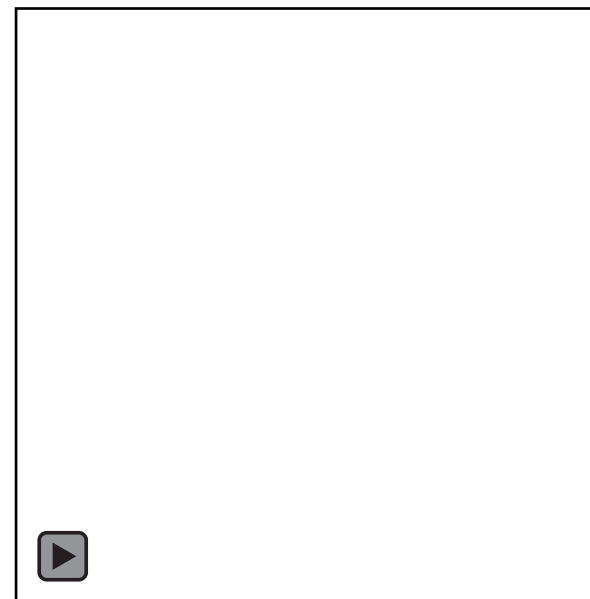
Течение крови



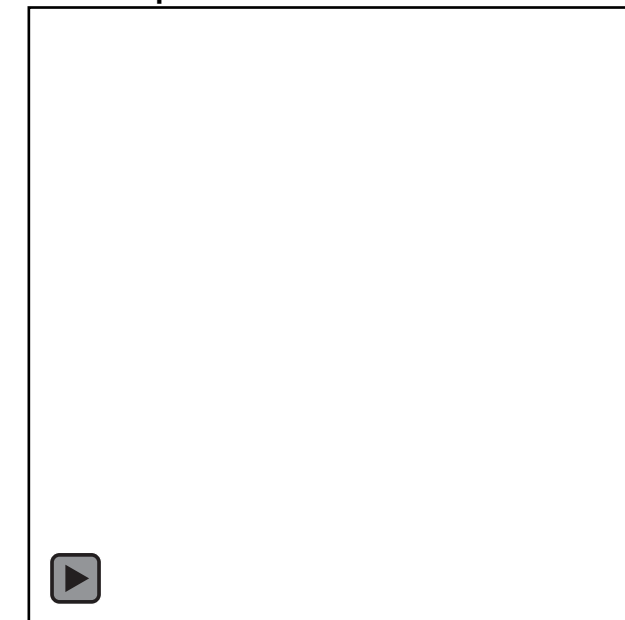
Каждый шаг мы перестраиваем и балансируем сетку, пересчитываем геометрию, дискретизацию, но самой сложной частью оказывается решение **седловой** системы.

Альтернатива: **блочный AMG (+слайды)**

(video slide)



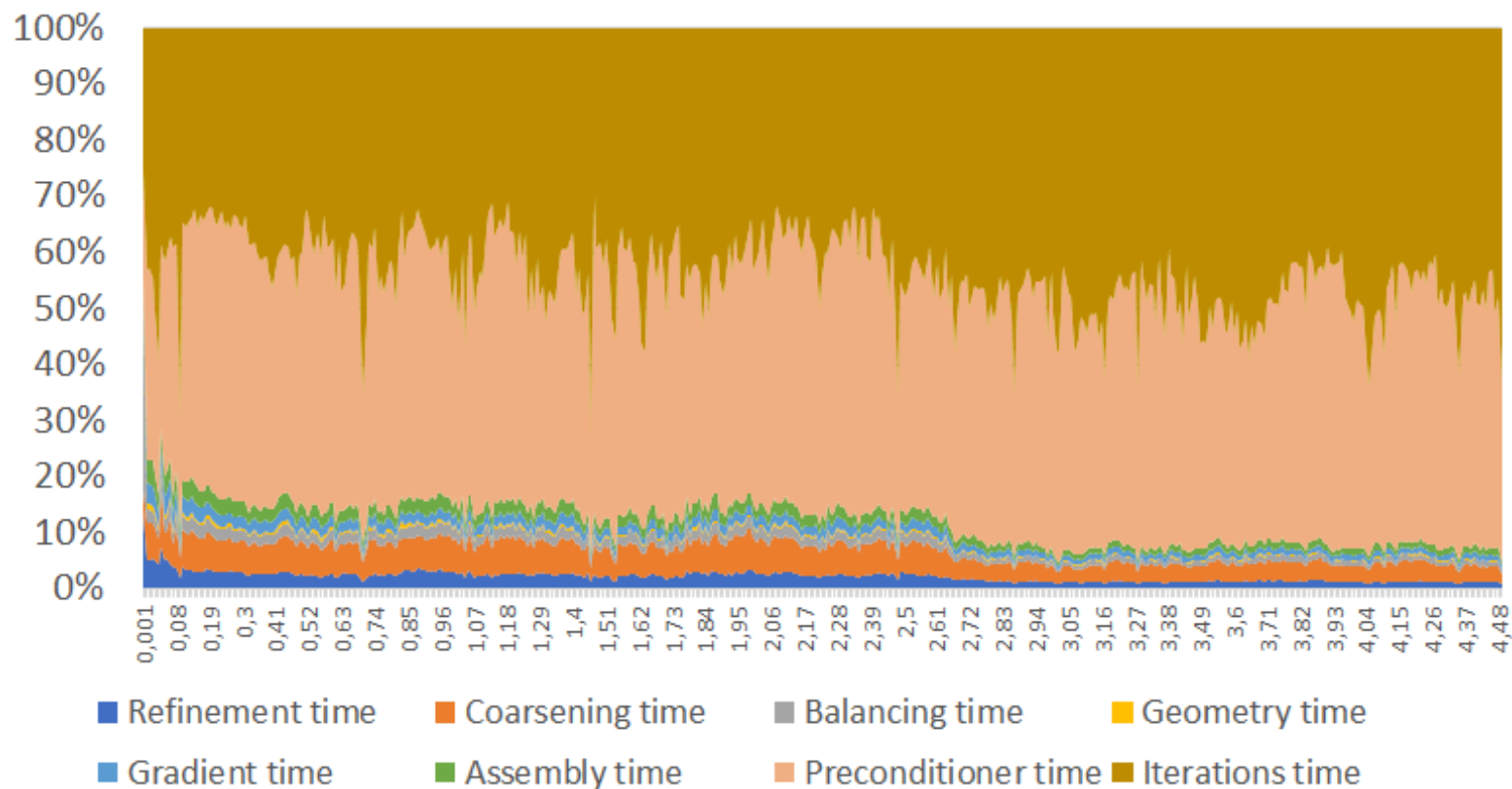
завихренность



декомпозиция

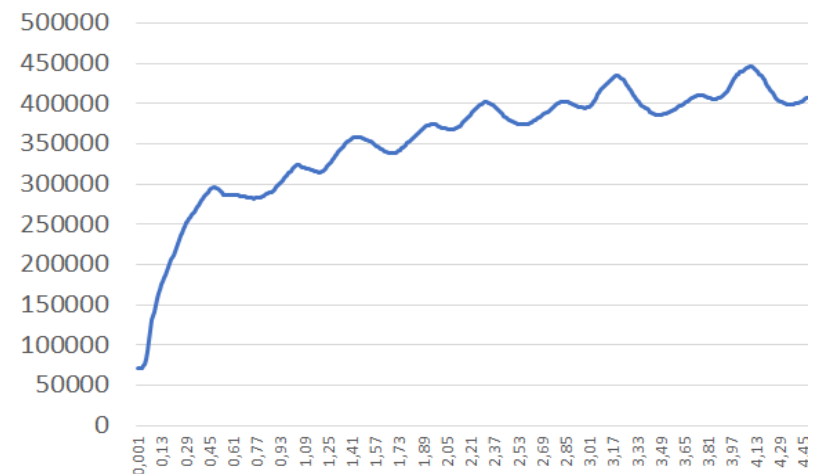


Течение крови

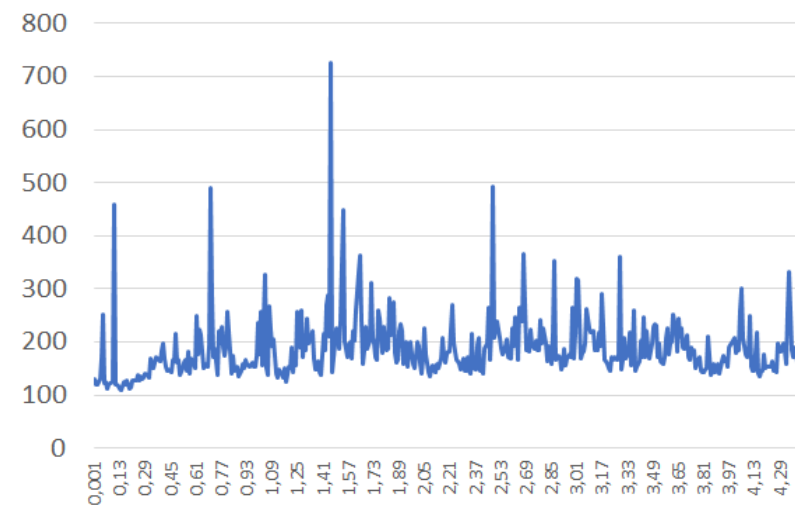


Каждый шаг мы перестраиваем и балансируем сетку, пересчитываем геометрию, дискретизацию, но самой сложной частью оказывается решение **седловой** системы.

Альтернатива: **блочный AMG (+слайды)**



Число ячеек



Линейных итераций



Дальнейшие направления

- Развитие **МКО**: автоматизация построения с учетом особенностей задач, исследование подходов для нелинейных систем.
- Развитие методов решения для схем: блочный **AMG**.
- Оптимизация работы с матрицами с учетом автоматического дифференцирования.
- Внедрение методов решения нелинейных систем.
- **Приложения...**
 - Взаимодействие жидкости с подвижными пороупругими границами.
 - Течение жидкости в разрушаемой упругопластичной среде.
 - Течение и свертываемость крови.

Спасибо за внимание

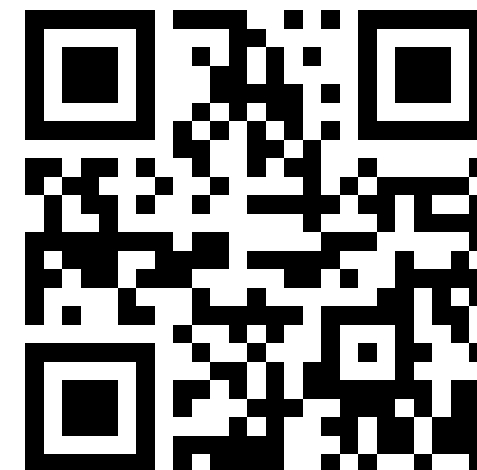
Контакты:

- kirill.terehov@gmail.com
- igor.konshin@gmail.com
- yuri.vassilevski@gmail.com

Поддержано:

РНФ 21-71-20024 (численные методы)

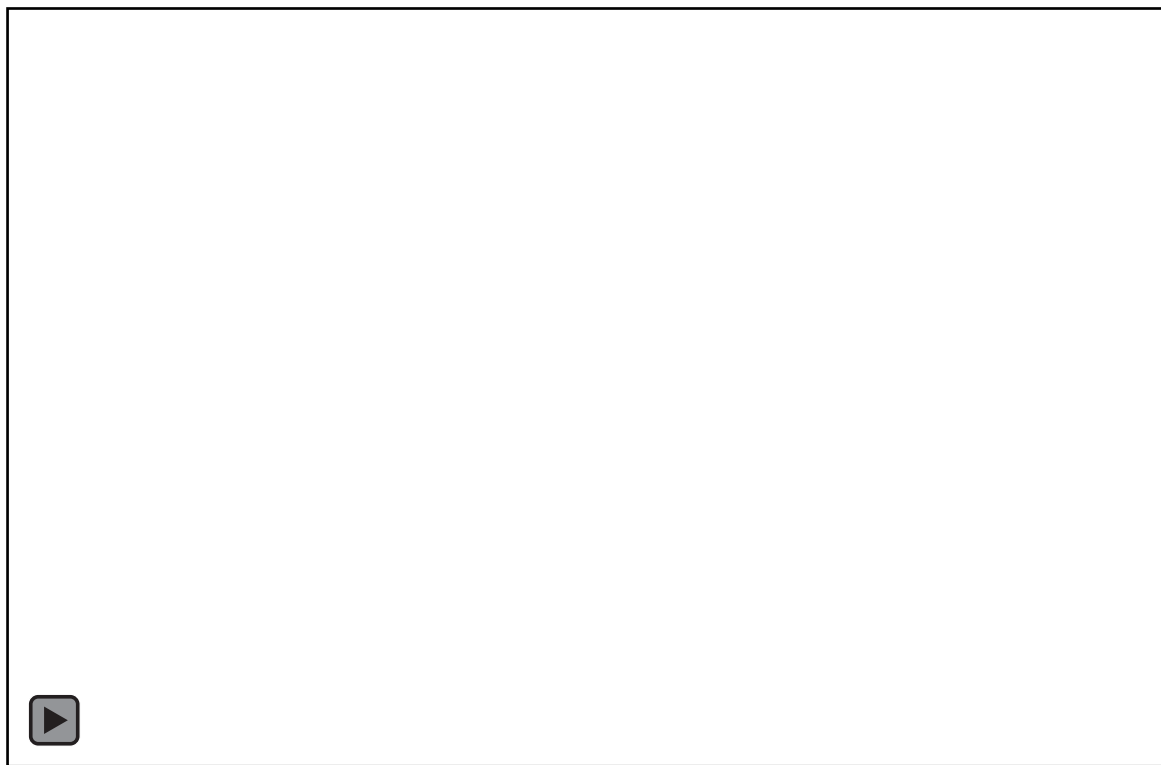
Минобрнауки 075-15-2022-286 (адаптивные сетки)



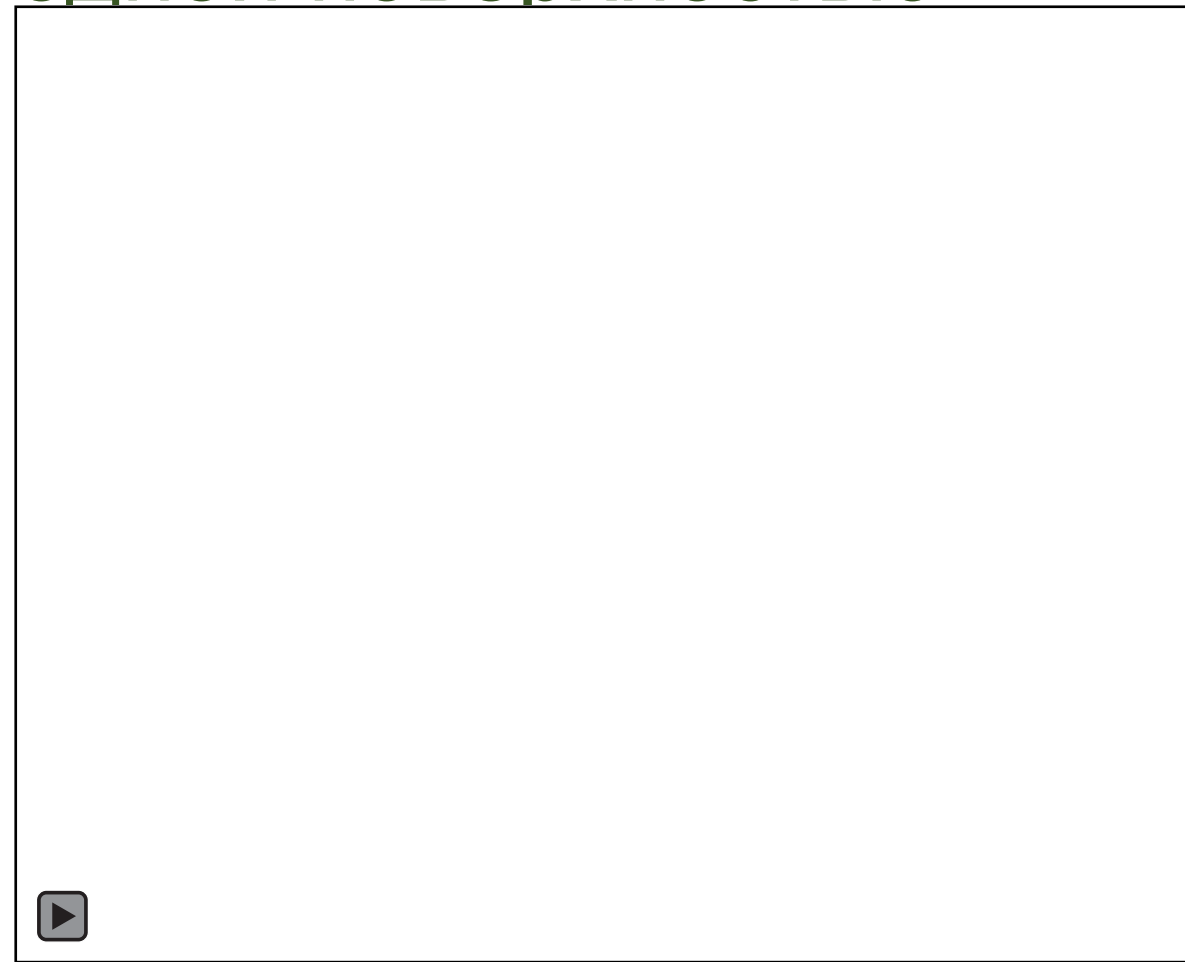
inmost.org



Жидкость со свободной поверхностью



Поверхность



Расчетная сетка



Жидкость со свободной поверхностью

Система: $\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu \nabla \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = \rho g \nabla z$

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{u}) = 0$$

$$|\nabla \varphi| = 1$$

Условие на поверхности:

$$-\frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T}{2} \mathbf{n} + p \mathbf{n} = \sigma \kappa \mathbf{n}$$

