

Динамически сгущаемые сетки в рамках программной платформы INMOST

А.И. Бурачковский¹, И.Н. Коньшин^{2,3}

МГУ, Москва¹, ИВМ РАН, Москва², ВЦ ФИЦ ИУ РАН, Москва³

Представляется программная платформа INMOST, предназначенная для работы с распределенными сетками общего вида, выполнения дискретизации, формирования и решения систем линейных уравнений. В рамках INMOST разработана и реализована распределенная структура данных для построения динамически сгущаемых и разгружаемых расчетных сеток на основе восьмидеревьев. Все разработки доступны на сайте программной платформы INMOST: www.inmost.org.

Ключевые слова: программная платформа, распределенные динамические сетки, гексаэдральные сетки, восьмидеревья.

1. Введение

Программная платформа INMOST (Integrated Numerical Modelling and Object-oriented Supercomputing Technologies) [1] была разработана в Институте вычислительной математики РАН. Она предназначена для обеспечения пользователя всеми необходимыми средствами при создании и исследовании различных численных моделей. Сюда входит не только работа с распределенными по процессорам сеточными данными для сеток общего вида, но и удобный интерфейс для выполнения дискретизации задачи, а также формирования и решения систем линейных уравнений.

Программная платформа INMOST предоставляет пользователю богатый функционал возможностей, обладает достаточной универсальностью применения, обеспечивает надежность и эффективность вычислений. Стоит также отметить открытость исходного кода [2], простоту установки на компьютер разработчика и удобство ее дальнейшего использования. Немаловажным также является поддержка программной платформы и ее дальнейшее развитие.

Данная работа является логическим продолжением работ [3,4] представленных на двух предыдущих конференциях NumGrid2012 и NumGrid2014, показывая новые разработки и проведенные за это время исследования. Развитие программной платформы коснулось большинства этапов численного моделирования: была разработана методика работы с распределенными динамическими сетками на основе использования «восьмидеревьев», на этапе дискретизации была разработана технология автоматического дифференцирования для согласованного формирования линейных систем, на этапе решения линейных систем была исследована параллельная эффективность различных линейных решателей, как входящих в состав программной платформы INMOST, так и решателей из внешних подключаемых пакетов.

В данной работе в основном будет представлена технология работы с динамическими расчетными сетками на основе программной платформы INMOST. Однако, перед тем как перейти к этому вопросу, следует сказать несколько слов о самой программной платформе.

Программная платформа INMOST разрабатывалась с учетом следующих критериев:

- богатый функционал возможностей;
- эффективность;
- надежность;
- универсальность;
- простота использования;
- открытость исходного кода.

В настоящее время достаточно трудно найти комплексы программ, удовлетворяющие сразу всем вышеперечисленным требованиям. Существующие в 2012 году на начало работы над INMOST решения, такие как, библиотека FMDB (Flexible distributed Mesh DataBase),

библиотека MOAB (A Mesh-Oriented datABase), библиотека MSTK (MeSh ToolKit), библиотека STK (Sierra ToolKit), пакет Salome, пакет OpenFOAM (Open Source Field Operation And Manipulation CFD ToolBox) и другие, обладали рядом недостатков и в полной мере не соответствовали заявленным критериям. У существовавших на тот момент решений не всегда была легкая переносимость между различными платформами (Windows, Linux), недостаточно надежные реализации, в некоторых пакетах было невозможно, либо проблематично внедрить свои схемы дискретизации. Однако стоит отметить, что имеются общедоступные пакеты, в некоторый степени, удовлетворяющие выбранным критериям и имеющие достаточно богатый функционал, которые могли бы использоваться для вспомогательных целей. Например, пакеты ParMETIS [5] и Zoltan [6] используются в программной платформе INMOST для распределения и перераспределения данных по процессорам, а пакеты PETSc [7] и Trilinos [8] применяются для решения систем линейных уравнений.

В настоящее время программная платформа INMOST используется в нескольких разработках:

- проект GeRa для расчета геомиграции радионуклидов, разрабатываемый в ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН;
- проект Floctree для расчета течений жидкости со свободной поверхностью, разрабатываемый в Стенфордском университете и ИВМ РАН;
- исследовательский код нефтяного симулятора, разрабатываемый в ИВМ РАН.

Программная платформа INMOST используется также некоторыми сотрудниками ИВМ РАН для исследовательской работы при разработке новых методов дискретизации для метода конечных объемов, а также при разработке новых решателей систем линейных уравнений.

Программная платформа INMOST находится в открытом доступе в виде исходных кодов на сайте [2].

2. Динамические сетки

При решении многих задач математической физики возникает необходимость использования динамических сеток. Это могут быть, например, задачи с движущимися объектами, моделирование течения жидкости со свободной поверхностью, моделирование течений с ударными волнами или рассмотрение задач с динамической адаптацией сетки к решению. Если процесс моделирования происходит на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью, то помимо построения адаптируемой сетки и ее изменения на каждом шаге по времени встает также задача динамического перераспределения ячеек между процессорами для более эффективного использования ресурсов вычислительной системы за счет балансировки вычислений.

Мы рассматриваем построение расчетных сеток с помощью технологии «восьмидеревьев» (octree), которая позволяет строить сетки, состоящие из кубиков, некоторые грани которых могут быть разбиты на 4 части, за счет измельчения вдвое шага сетки в соседних ячейках. Эта технология (см., например, [9]) позволяет строить сетки, адаптируемые во всех трех измерениях (см. рис. 1). Однако для большей наглядности, в дальнейших иллюстрациях мы будем приводить вид сверху, несмотря на то, что все сетки будут оставаться трехмерными. Заметим также, что построенные сетки при измельчении остаются конформными.

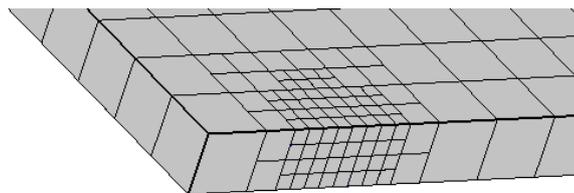


Рис. 1. Сгущение сетки во всех 3-х измерениях

Для рассмотрения динамических сеток на основе «восьмидеревьев» мы использовали модельный пример со сгущением и разгрублением сетки вслед за движением курсора мыши (см. рис. 2).

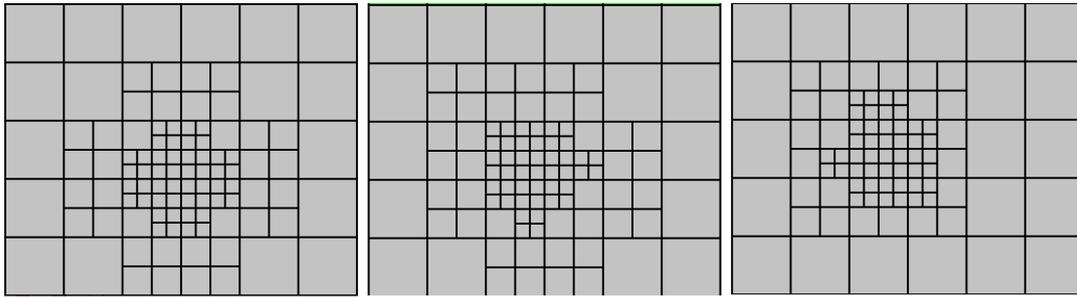


Рис. 2. Сгущение сетки вслед за движением курсора мыши

При разработке многопроцессорной версии работы с сетками на основе технологии «восьмидеревьев», необходимо было разработать структуру данных, которая была бы локальной для каждой из ячеек сетки. Это необходимо для того чтобы можно было сохранять ее в тегах программы платформы INMOST, прикрепляемых к каждой ячейке, для дальнейшей организации обменов при согласованном изменении сетки на границе между процессорами (см. рис. 3, где различными, по возможности, цветами показаны ячейки, принадлежащие различным процессорам). В рассматриваемую структуру данных входит информация об «уровне» ячейки (т.е. количестве ее «предков»), «расположении» самой ячейки внутри «родительской», а также вся наследуемая информация от «родительских» ячеек. Информацию от «родительских» ячеек необходимо сохранять внутри «потомков», т.к. «родительская» ячейка удаляется из сетки при разбиении ее на 8 «потомков» с вдвое меньшим шагом сетки, а хранить ее неявно в некоторой глобальной структуре не представляется возможным из-за использования многопроцессорной архитектуры с распределенной памятью.

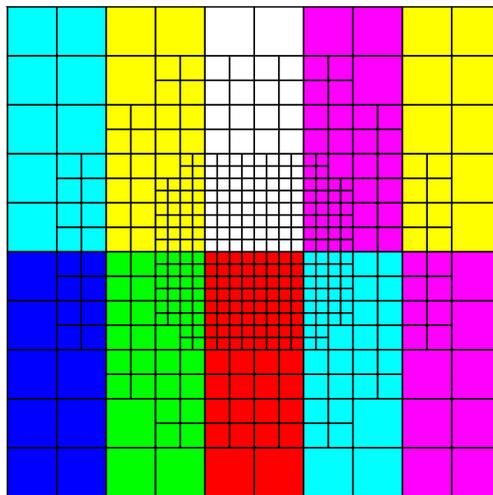


Рис. 3. Согласованное измельчение сетки

После того как построена согласованная сетка на нескольких процессорах, необходимо проанализировать количество полученных ячеек на каждом из процессоров, а также их отличие от среднего значения. В принципе, может оказаться так, что большая часть сетки находится на одном из процессоров, в этом случае ситуация будет не слишком отличаться от последовательного решения задачи (см. рис. 4). Таким образом, при работе с динамическими сетками одним из важных этапов работы программной платформы INMOST становится балансировка сетки.

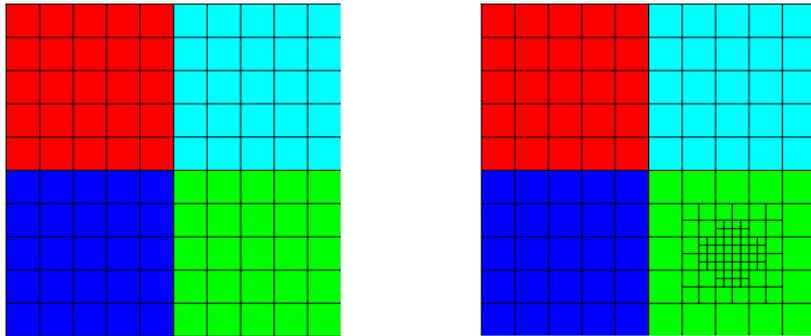


Рис. 4. Необходимость балансировки сетки

Наряду с выполнением обменов данными между процессорами, программная платформа INMOST позволяет производить перераспределение сетки между процессорами, обеспечивая сбалансированность вычислительной нагрузки. Удобнее всего воспользоваться внешними пакетами ParMetis [5] или Zoltan [6], применение которых при сборке INMOST указывается флагами «USE_PARTITIONER_PARMETIS=ON» или «USE_PARTITIONER_ZOLTAN=ON», соответственно. Перераспределение сетки в рамках программной платформы INMOST характеризуется следующими «действиями»:

- «Partition» – распределение сетки без использования информации о текущем распределении, оно может занимать значительное время и обычно вызывается только один раз перед началом вычислений;
- «Repartition» – перераспределение сетки, которое, по возможности, оставляет большинство ячеек на тех же процессорах, где они и находились до вызова перераспределения, это «действие» также может занимать достаточно большое время, но зато оно старается минимизировать пересылки данных при обмене ячейками, может вызываться, например, на каждой 10-й итерации по времени;
- «Refine» – попытка сбалансировать распределение небольшим количеством обменов ячейками между соседними процессорами, качество балансировки не гарантировано, однако время выполнения минимально, так что это перераспределение может вызываться на каждом шаге по времени.
- Выбор «действия» и конкретного типа перераспределения осуществляется с помощью функции `Partitioner::SetMethod()`, а само перераспределение проводится при вызове функции `Partitioner::Evaluate()` и `Mesh::Redistribute()`.

На рис. 5 показаны три сетки, распределенные на 9 процессоров: исходная сетка, при использовании равномерного геометрического распределения; сетка, полученная после выполнения двухуровневой адаптации к центральной точке; и сетка, полученная после применения перераспределения «Repartition» с целью сбалансировать количество узлов на различных процессорах.

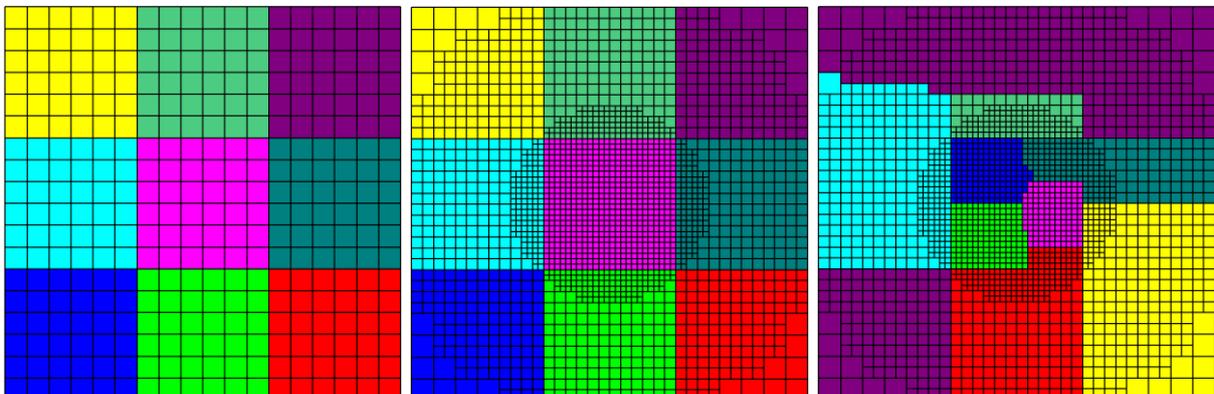


Рис. 5. Распределенные сетки: исходная, адаптированная, после балансировки

Таким образом, описан механизм работы с распределенными адаптивными динамическими сетками на основе технологии «восьмидеревьев». В принципе, сторонние пользователи программной платформы INMOST, могут напрямую применять разработанную распределенную структуру данных. Для этого необходимо в соответствии с потребностями решаемой задачи переопределить функции «cell_should_split()» и «cell_should_unite()», которые контролируют процессы сгущения и разгрубления сетки. Описанный пример работы с динамическими сетками выложен в открытый доступ на сайт INMOST [2] в разделе «Examples».

3. Заключение

Продемонстрирована методика построения распределенных динамических сеток на основе использования технологии «восьмидеревьев» в рамках структур, используемых в программной платформе INMOST. Приведены результаты построения сеток и процесса их балансировки.

Литература

1. 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.
2. INMOST – a toolkit for distributed mathematical modeling. URL: <http://www.inmost.org>.
3. Василевский Ю.В., Коньшин И.Н., Копытов Г.В., Терехов К.М., Программная платформа и графическая среда для разработки параллельных численных моделей на сетках общего вида. Международная конференция «Численная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления» (NUMGRID2012), ВЦ РАН им. А.А.Дородницына, Москва, 17-19 декабря, 2012 ВЦ РАН им. А.А.Дородницына, Москва, 16 декабря, 2014.
4. Коньшин И.Н., Особенности решения незнакоопределенных и седловых линейных систем с помощью неполного треугольного разложения второго порядка, Международная конференция «Численная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления» (NUMGRID2014), ВЦ РАН им. А.А.Дородницына, Москва, 15-16 декабря, 2014.
5. ParMETIS: Parallel Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering. URL: <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>.
6. Zoltan: Parallel Partitioning, Load Balancing and Data-Management Services. URL: <http://www.cs.sandia.gov/zoltan>.
7. PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation). URL: <https://www.mcs.anl.gov/petsc>.
8. The Trilinos Project. URL: <https://trilinos.org>.
9. Terekhov K., Vassilevski Yu. Two-phase water flooding simulations on dynamic adaptive octree grids with two-point nonlinear fluxes // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling (2013) V. 28, No. 3, P. 267–288.