



# INMOST – программная платформа для распределенного математического моделирования

**Кирилл Терехов<sup>1</sup>, Юрий Василевский<sup>1,2,3,4</sup>**

<sup>1</sup>Институт Вычислительной Математики им. Г.И. Марчука Российской Академии Наук

<sup>2</sup>Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

<sup>3</sup>Первый Московский Государственный Медицинский Университет им. И.М. Сеченова

<sup>4</sup>Московский Физико-Технический Институт



Russian Supercomputing Days



# INMOST

обзор функционала



# Что такое INMOST?

## ● **INMOST** аббревиатура:

- Integrated
- Numerical
- **Modeling** and
- Object-oriented
- Supercomputing
- Technologies
- Интегрированные
- Объектно-ориентированные
- Суперкомпьютерные
- Технологии
- Численного
- **Моделирования**

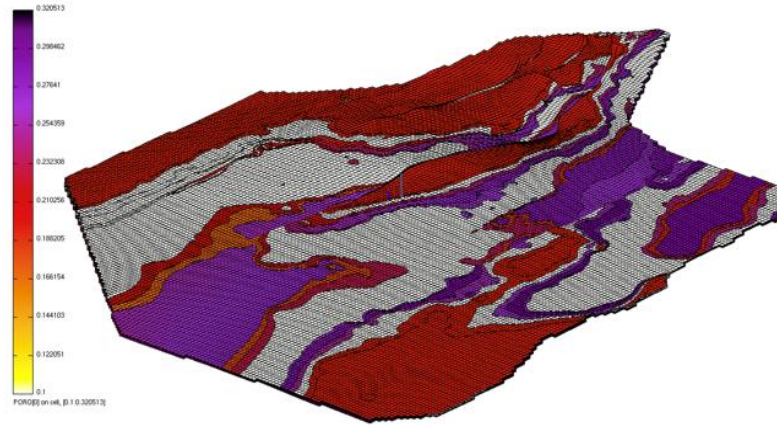
## ● Первая тестовая версия появилась в 2012 г. во время стажировки в Exxon-Mobil



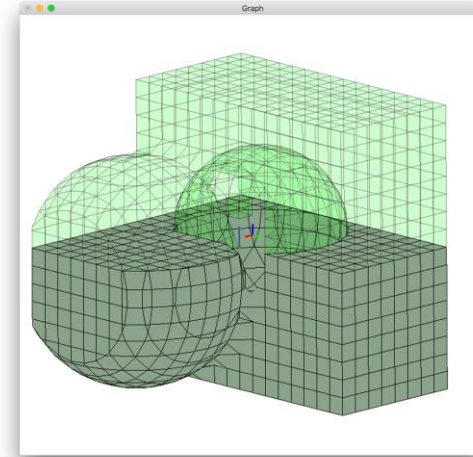
# INMOST: поддержка сеток



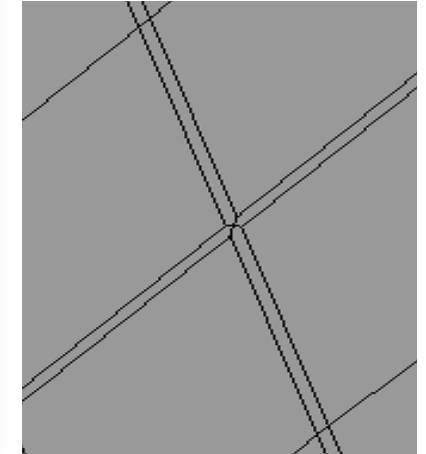
Модель  
человеческого тела



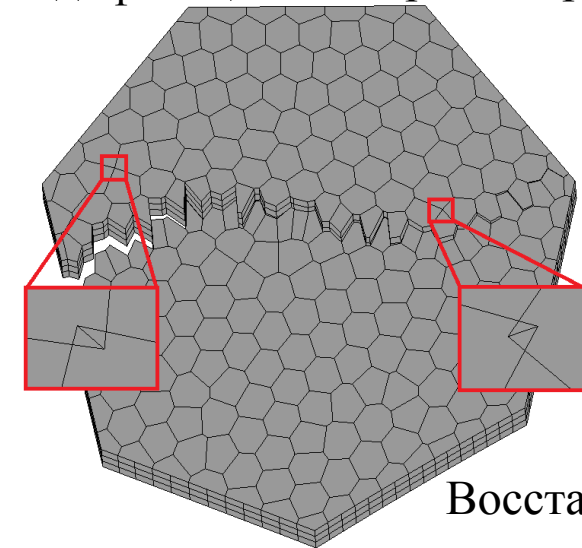
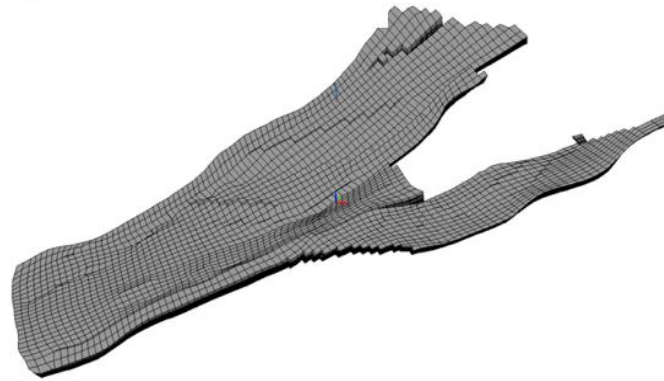
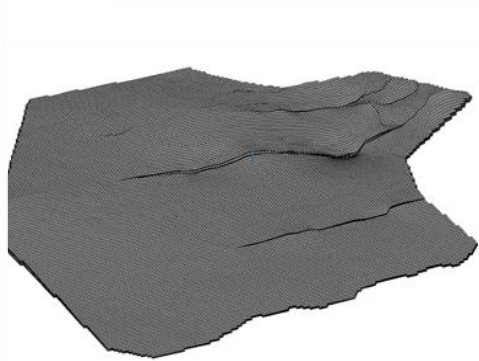
Геологические сетки с выклиниванием,  
поддержка входных данных коммерческих  
симуляторов нефти и газа



Сложные модификации



Вскрытие трещин

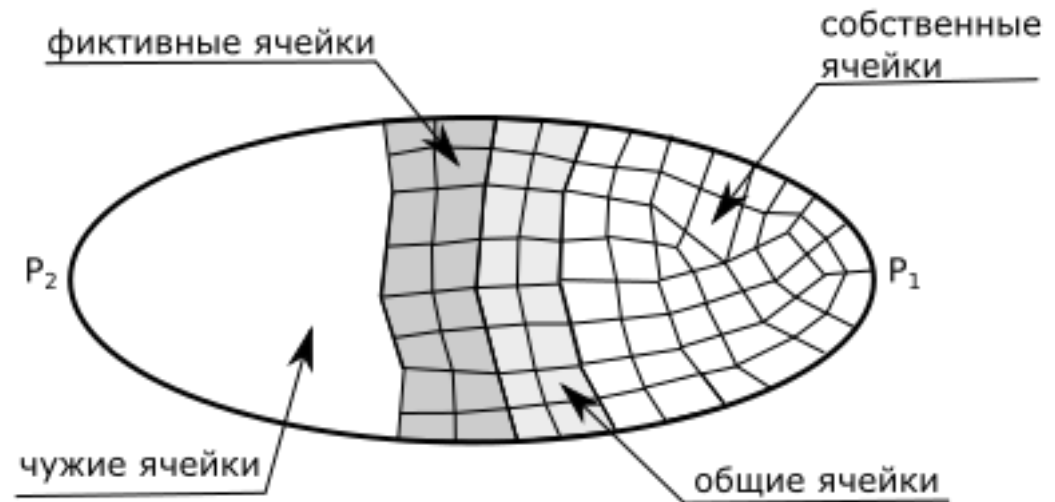


Восстановление  
сеток



# INMOST: декомпозиция области

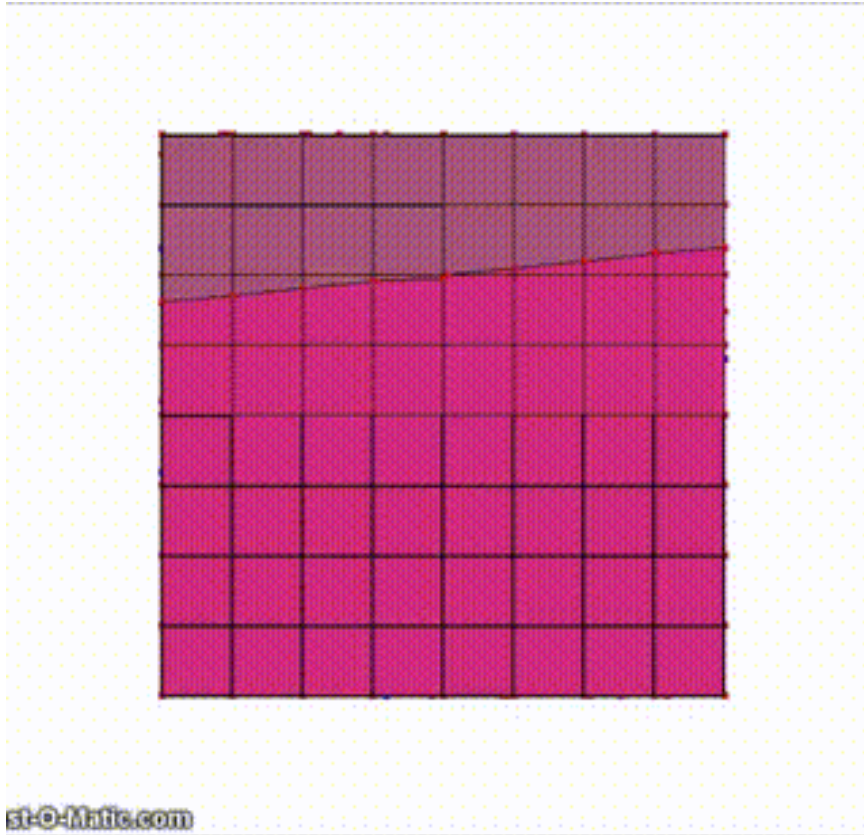
- Методы декомпозиции области:
  - Вызов ParMetis, Zoltan
  - **Встроенные:**
    - На основе упорядочивания Cuthill-McKee
    - К-кластеризация
- Сеточный функционал:
  - Миграция элементов сетки для декомпозиции и **балансировки**
  - **Любое** количество слоев перекрытия между сетками на процессорах
  - **Обмен** сеточными данными
  - Параллельный файловый формат



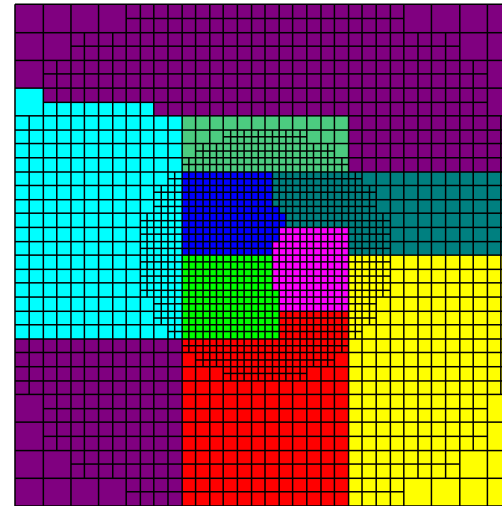




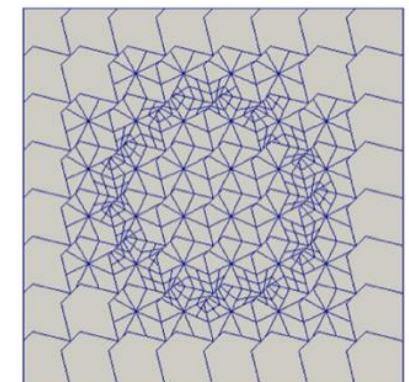
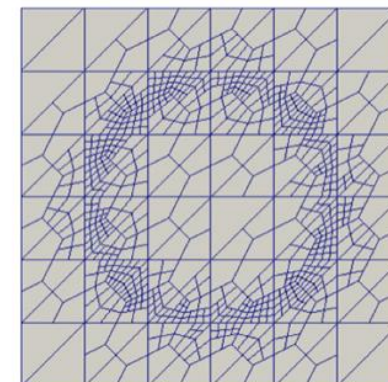
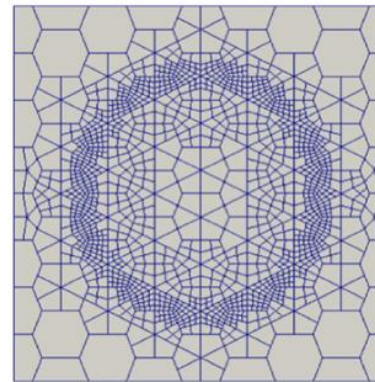
# INMOST: поддержка динамических сеток



Встроенный пример **OctreeCutcell**



Параллельная масштабируемая адаптация и балансировка сетки

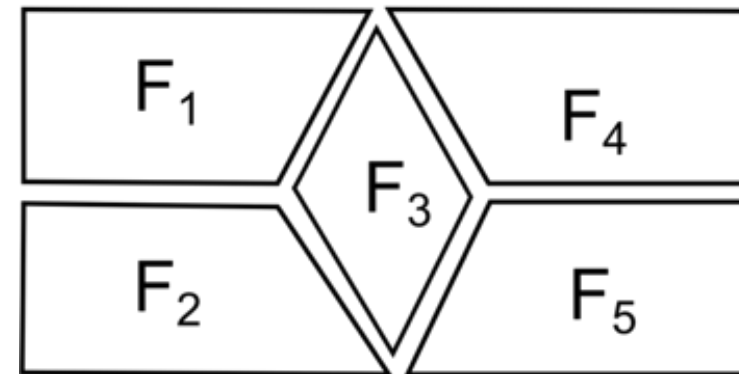
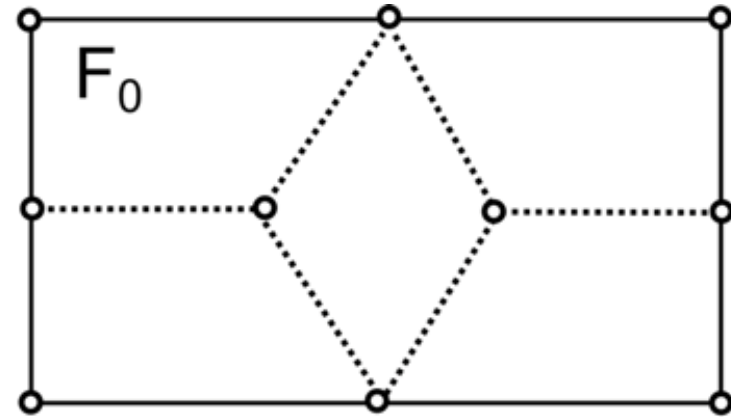


Пример **AdaptiveMesh** для адаптации сеток общего вида



# INMOST: поддержка динамических сеток

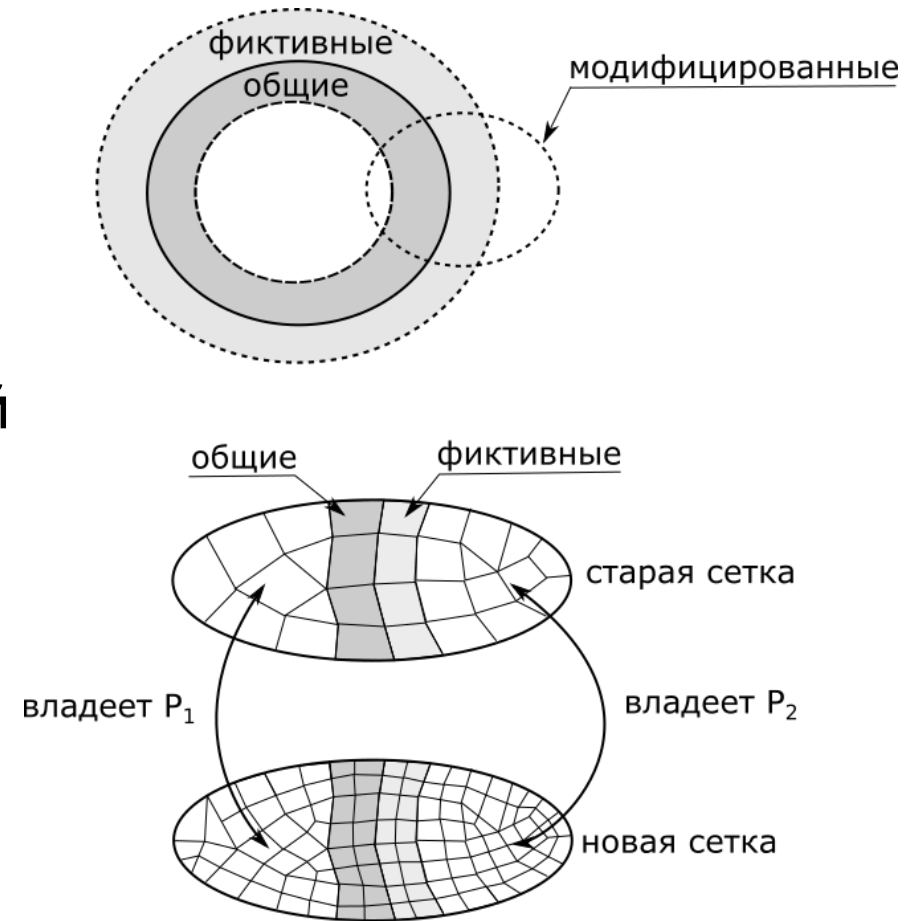
- Можно отсоединять и **удалять** элементы, а затем **создавать** новые
- Вспомогательный функционал:
  - **разделить** ребро по узлам
  - **разделить** грань по ребрам
  - **разделить** ячейку по граням
  - **объединить** элементы





# INMOST: поддержка динамических сеток

- Сетку можно перевести в режим **модификации**:
  - удаленные элементы и их данные **остаются** до окончания модификации
  - можно переключиться между старой и новой сеткой для **переноса данных**
  - разметка принадлежности элементов, необходимо для обменов данными
  - восстановление фиктивных слоев

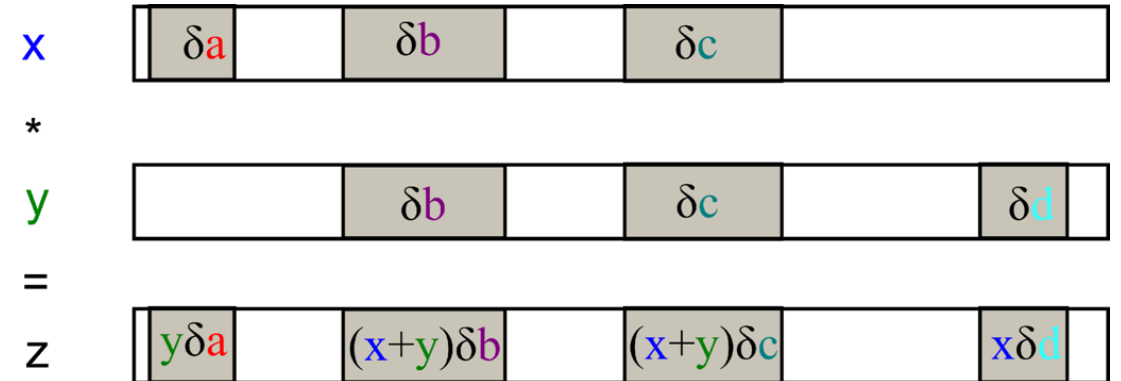






# INMOST: авто-дифференцирование

- Позволяет одним кодом получить:
  - невязку
  - **якобиан**
  - **гессиан**
- Очень **полезно** для **СЛОЖНЫХ** нелинейных задач



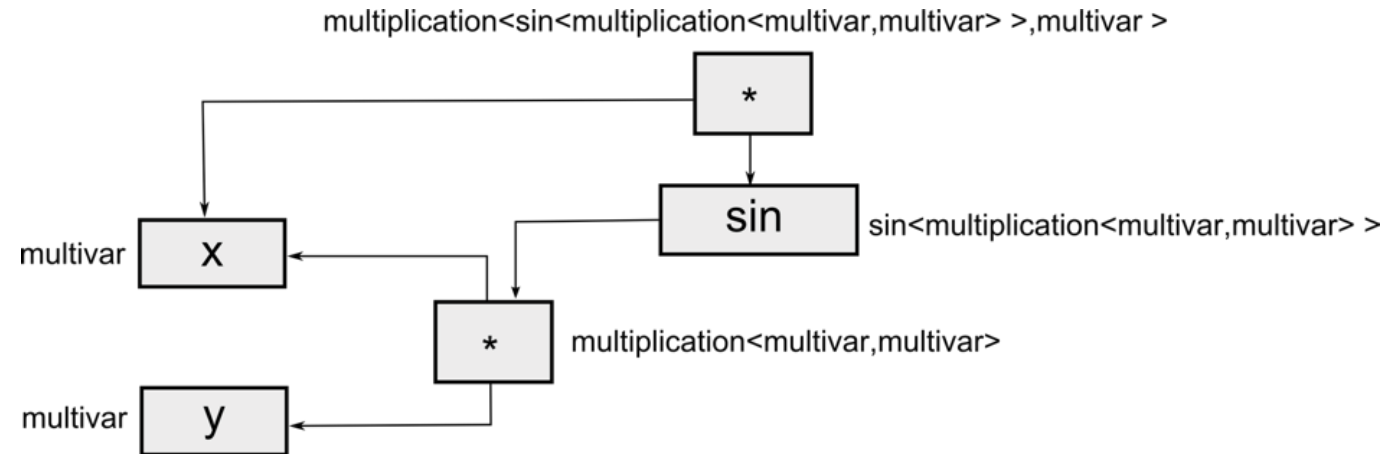
$$x\{\partial a + \partial b + \partial c\} * y\{\partial b + \partial c + \partial d\} = x * y\{y\partial a + (x+y)\partial b + (x+y)\partial c + x\partial d\}$$



# INMOST: авто-дифференцирование

- Реализовано посредством шаблонных выражений в C++
- Большая часть кода формируется и оптимизируется на этапе компиляции
- Поддерживает матрично-векторные операции, подмножество функционала **BLAS-Lapack**
- Простота использования

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

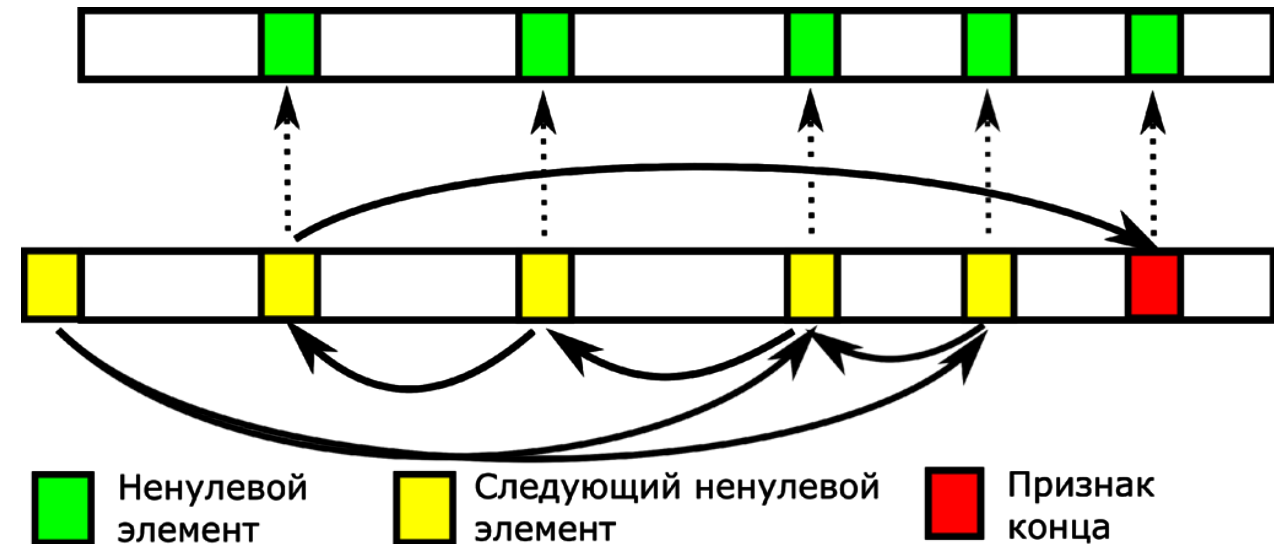


внутреннее представление выражения  $x*\sin(x*y)$



# INMOST: авто-дифференцирование

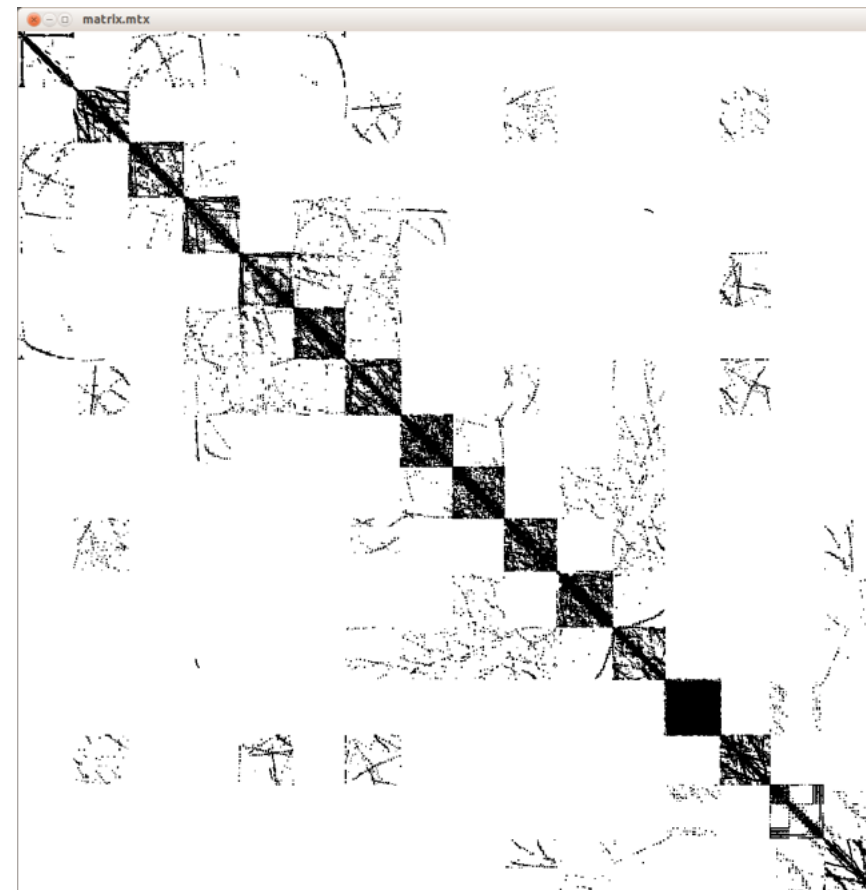
- Основные операции:
  - сложение разреженных векторов
  - умножение на число
- Быстрый метод сложения из ILU предобуславливателей:
  - массив значений
  - массив указателей на ненулевой элемент
  - вставка  $O(1)$ , запрос  $O(1)$
- Взаимодействие с сеткой:
  - хранение данных с производными
  - ввод данных как неизвестных





# INMOST: решение линейных систем

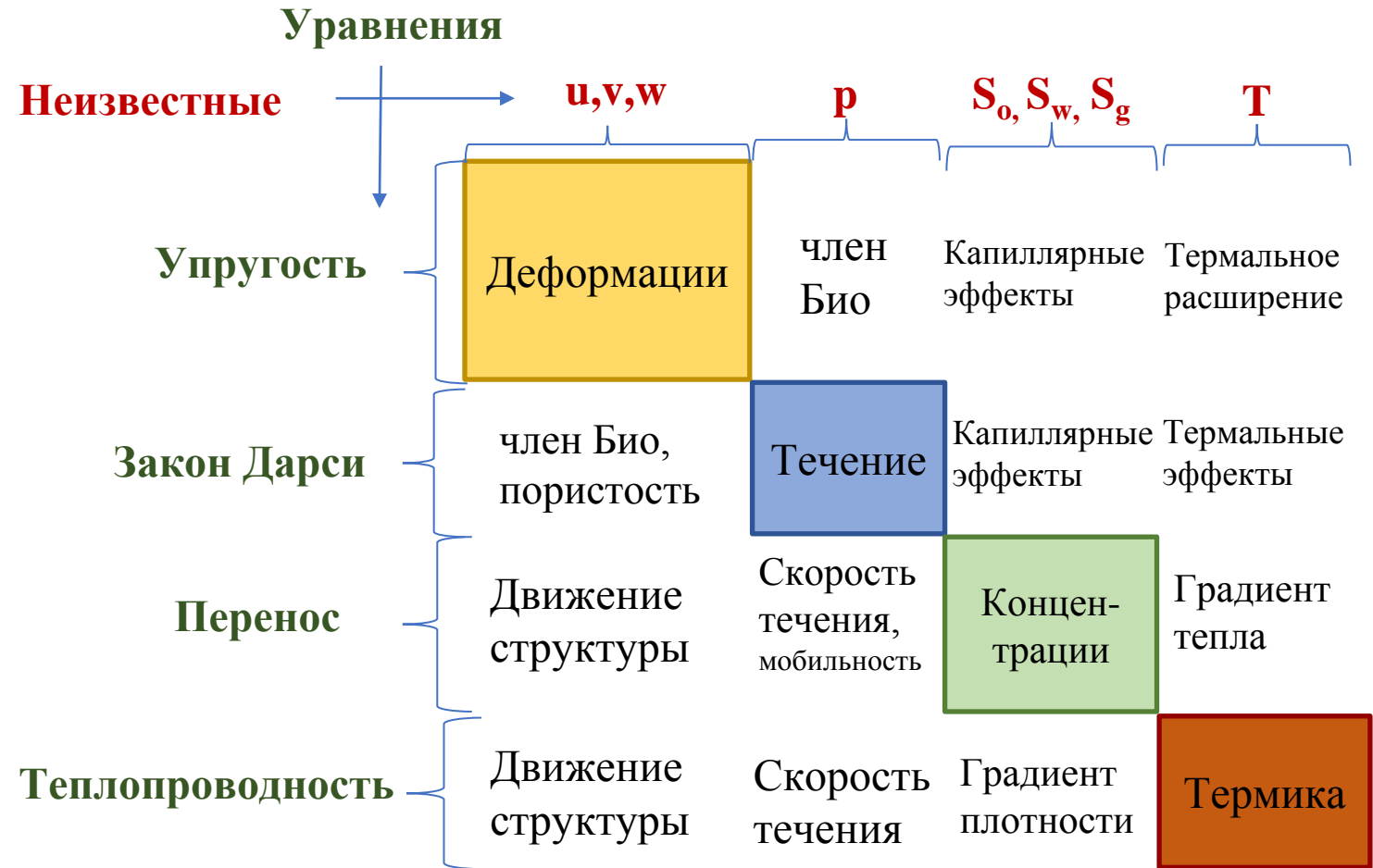
- **Простые** структуры для параллельной сборки систем линейных уравнений.
- **Параллельные** методы решения:
  - Вызов PETSc, Trilinos, SuperLU, Hypre.
  - Встроенные методы:
    - ILU( $\tau, \tau^2$ ) и Crout-ILU( $\tau, \tau^2$ ) второго порядка
    - Максимизация произведения на диагонали
    - Минимизация заполнения
    - Масштабирование в дважды-стохастический вид или I-доминирование
    - Динамический подбор  $\tau$  по числу обусловленности LU
    - Многоуровневое вычисление дополнения по Шуру
    - Пивотирование по диагонали или числу обусловленности
    - Многослойный аддитивный метод Шварца





# INMOST: мультифизика

- Расщепление симулятора на отдельные **модели**
- **Модели** соединяются через
  - **функции**: мобильность, плотность, пористость
  - **потоки**: член Био, несжимаемость, 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







# INMOST: востребованность

## ● Пользователи:

- **ИВМ РАН** – группа Юрия Василевского
- **ИБРАЭ РАН** – лаборатория Ивана Капырина, код GeRa
- **Стэнфорд**, США – группа Хамди Челепи, код AD-GPRS
- **НВКУ**, Катар – Ахмад Абушаика
- **TU Delft**, Голландия – Денис Восков

## ● Использовался в проектах с:

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



# INMOST: разработка

- Дальнейшее развитие:
  - Модули INMOST:
    - поддержка мультифизики
    - работы с геометрией области
    - работы с сеточными генераторами
    - визуализации
  - Детальная документация
  - Книга по конечным объемам с издательством Springer



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 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

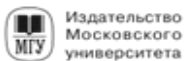
INMOST



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

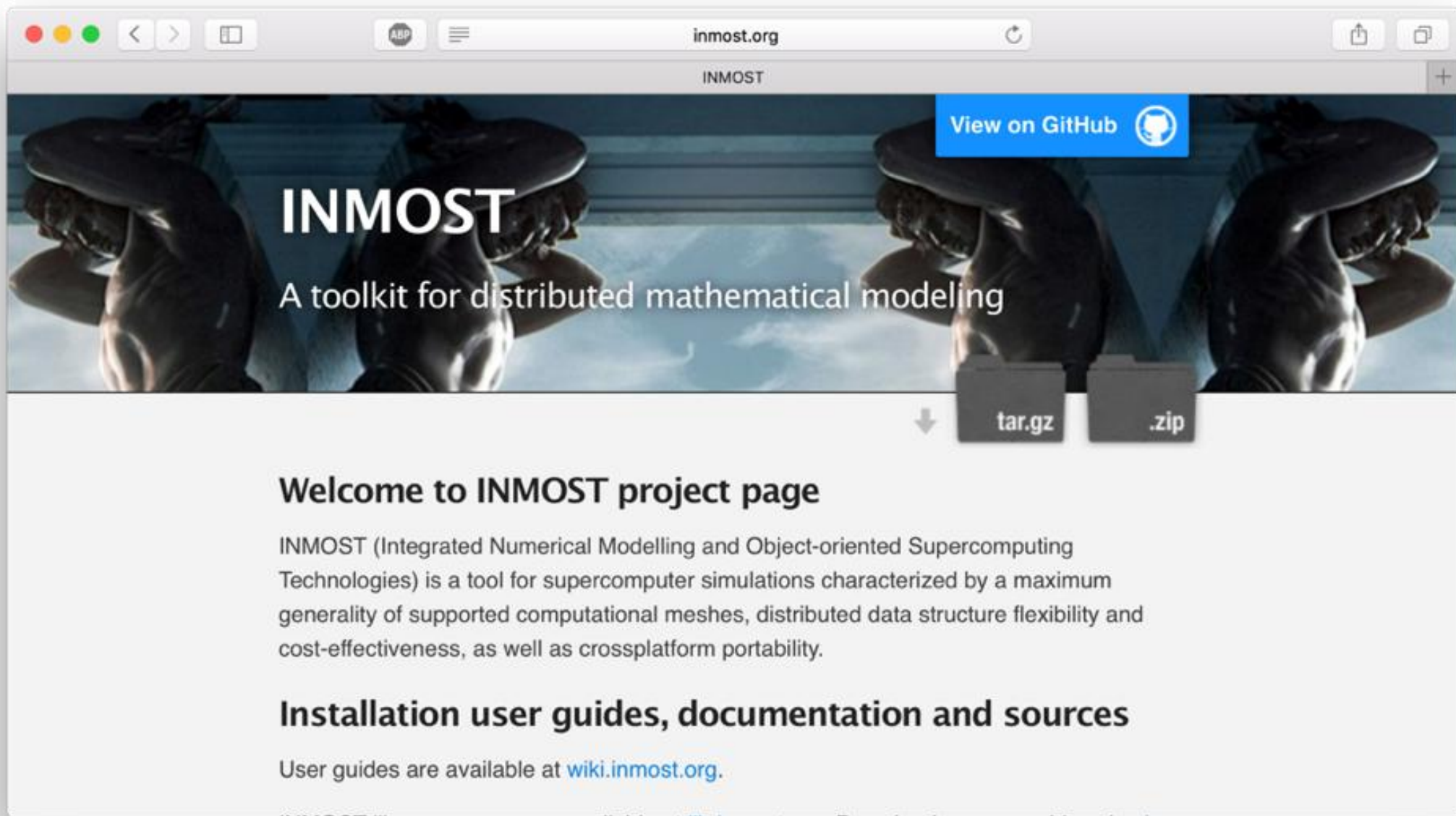


9 785211 064805



Суперкомпьютерный  
консорциум  
университетов России









# Ссылки на INMOST

- Проект с открытым исходным кодом
  - Поддерживается
  - Платформено-независим
  - Множество **примеров** и **инструментов**
  - **BSD**-лицензия
- Компилируется с использованием **cmake**
- Управляется посредством **git**
  - <http://github.com/INMOST-DEV/INMOST>
  - <http://boogie.inm.ras.ru/terekhov/INMOST>
- Короткий адрес проекта: <http://www.inmost.org>
- Документация **Doxygen**: <http://doxy.inmost.org>
- Документация **Wiki**: <http://wiki.inmost.org>



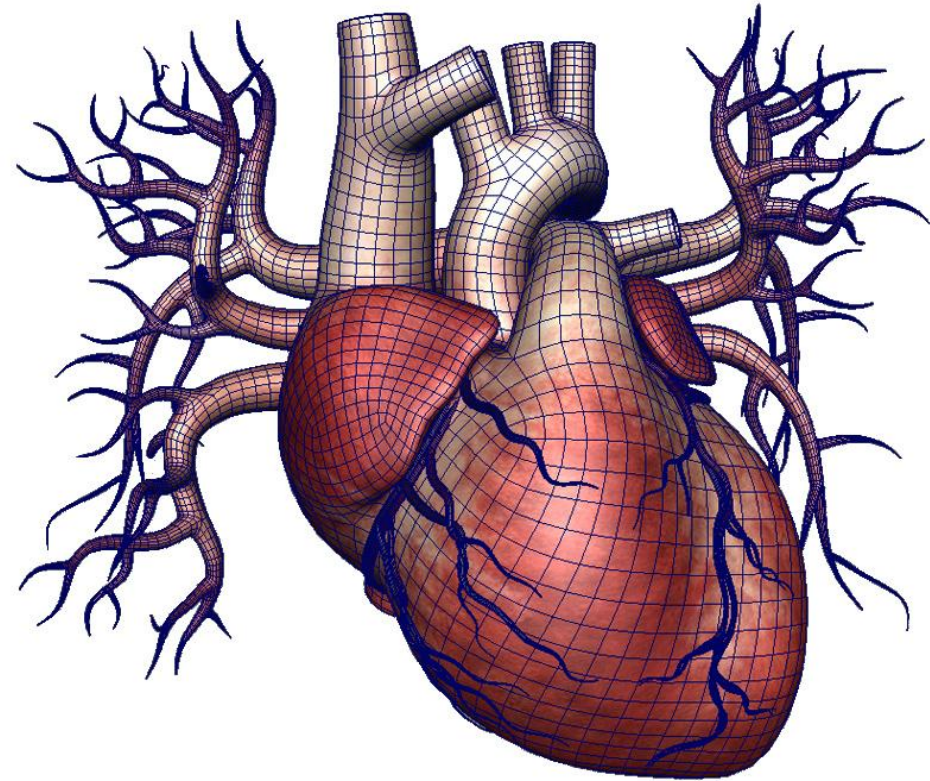
# Математическое моделирование

примеры



# Медицина

- Моделирование применяется в случаях, когда непосредственное наблюдение и измерение невозможно или экономически не оправдано
- Неинвазивные методы наблюдения:
  - Рентген – короткий период
  - УЗИ – слабое разрешение
  - ЭЭГ – только для мозга
  - МРТ – дорого
- Требуются многократные эксперименты при различных сценариях

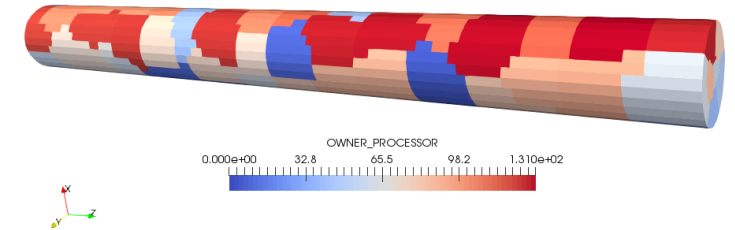




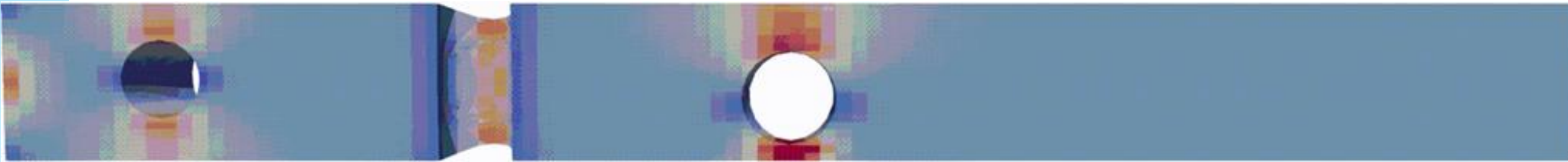
# Несжимаемая жидкость

Неизвестные:  $u, v, w, p$

$$\text{Уравнения: } \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu \nabla \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = 0$$
$$\text{div}(\mathbf{u}) = 0$$



Декомпозиция области:  
36 процессоров: 2.51 сек  
92 procs: 1.25 sec



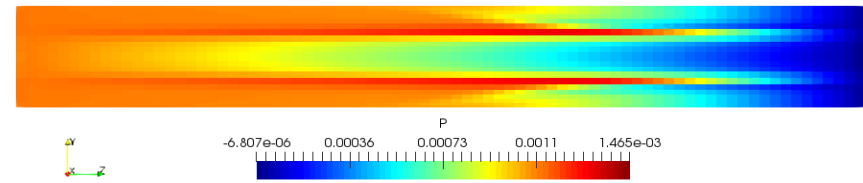
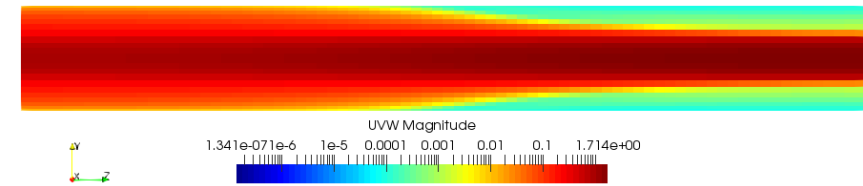
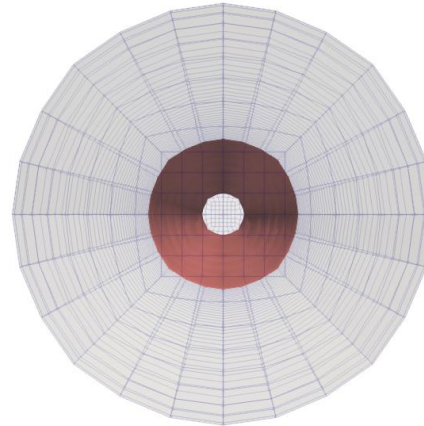
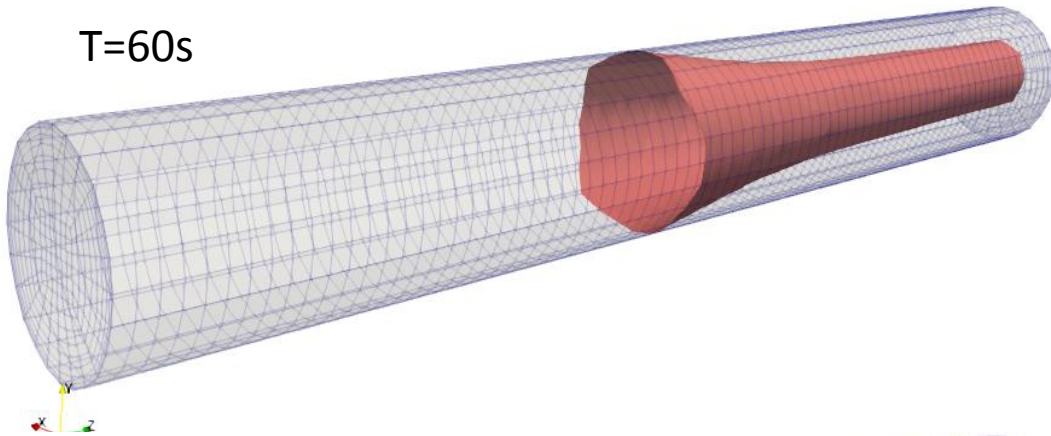


# Моделирование свертываемости крови

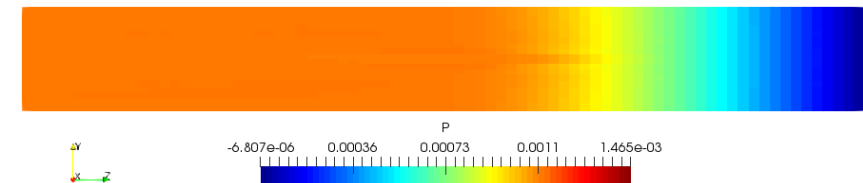
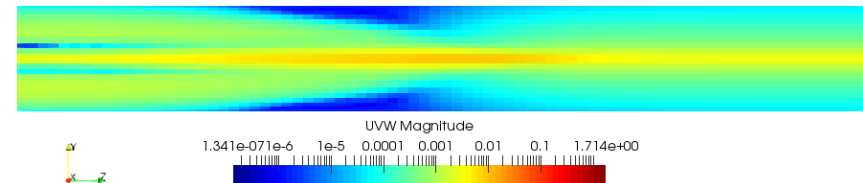
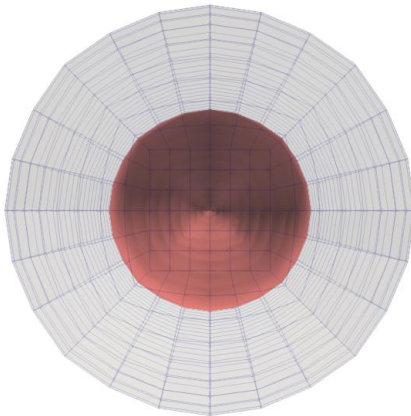
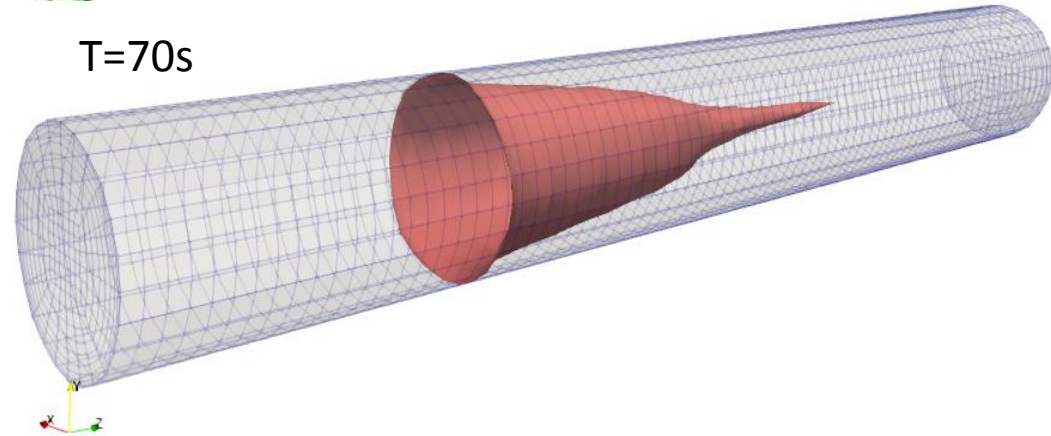
**Неизвестные:**  $u, v, w, p, PT, T, A, Va, F, Fr, Fg, \varphi_f, \varphi_c$

**Уравнения:** уравнения Навье-Стокса для несжимаемой жидкости с членом Дарси, нелинейные перенос-диффузия с каскадом реакций

T=60s



T=70s



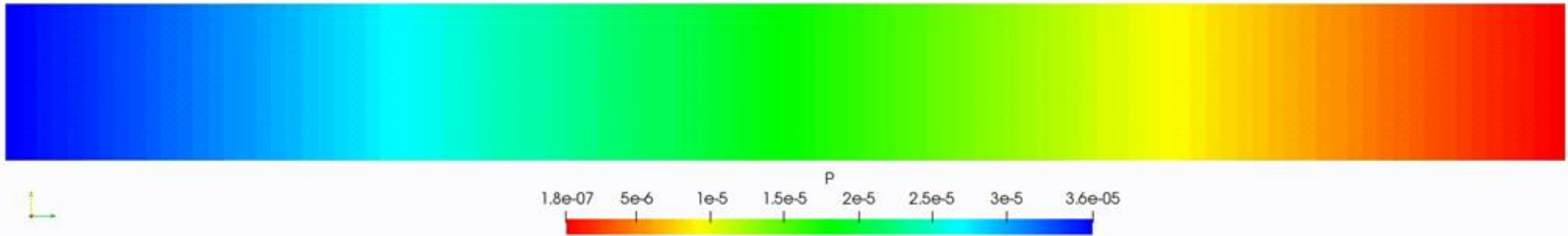




# Моделирование образования тромба

**Неизвестные:**  $u, v, w, p, PT, T, A, Va, F, Fr, Fg, \varphi_f, \varphi_c$

**Уравнения:** уравнения несжимаемого Навье-Стокса с членом Дарси,  
нелинейные перенос-диффузия с каскадом реакций



Образование тромба и остановка потока крови.

Цветом изображено поле давления.

Коричневая поверхность соответствует изоповерхности концентрации фибрин-полимера.



# Нефть и газ

- Моделирование – основной инструмент принятия решения перед бурением скважин
- Метр бурения скважины на нефть обходится в среднем в 25000 руб.
- Требуется пробурить 2-3 км
- Трудноизвлекаемые запасы добывают посредством гидроразрыва пласта







# Нефть и газ

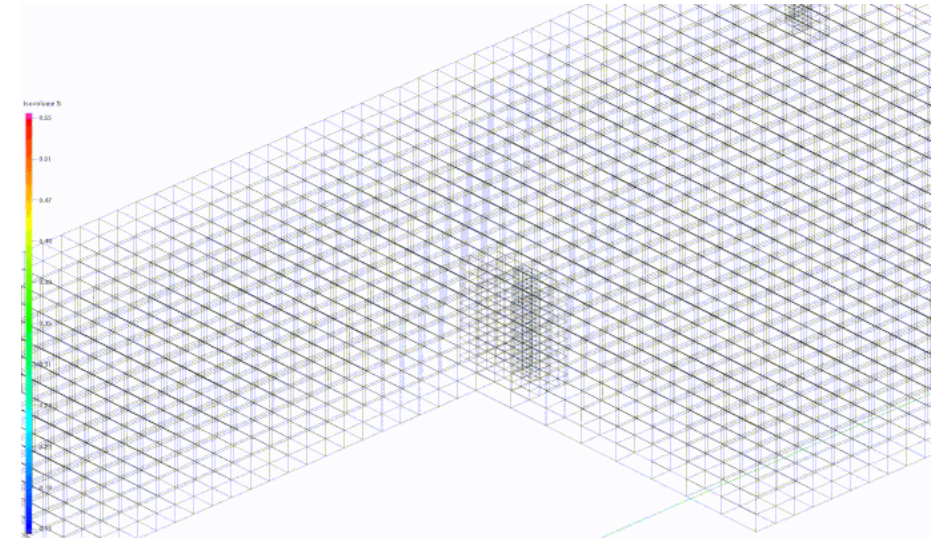
Неизвестные:  $p, S_o, S_g$  или  $p_b$  в зависимости от состояния

Уравнения:

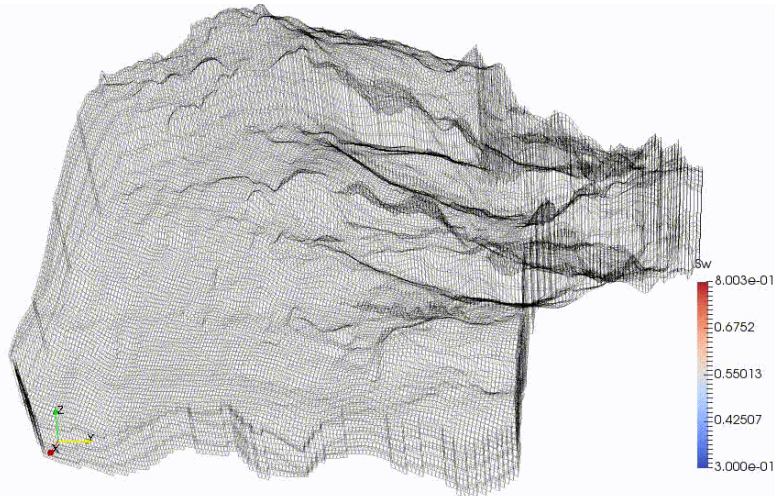
$$\frac{\partial \rho_w \theta S_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_w \mathbb{K}(\nabla p - \rho_w g \nabla z)) = q_w$$

$$\frac{\partial \rho_o \theta S_o}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_o \mathbb{K}(\nabla p - \nabla P c_o - \rho_w g \nabla z)) = q_o$$

$$\frac{\partial \rho_g \theta (R S_o + S_g)}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_g \mathbb{K}(\nabla p - \nabla P c_g - \rho_g g \nabla z)) = q_g$$

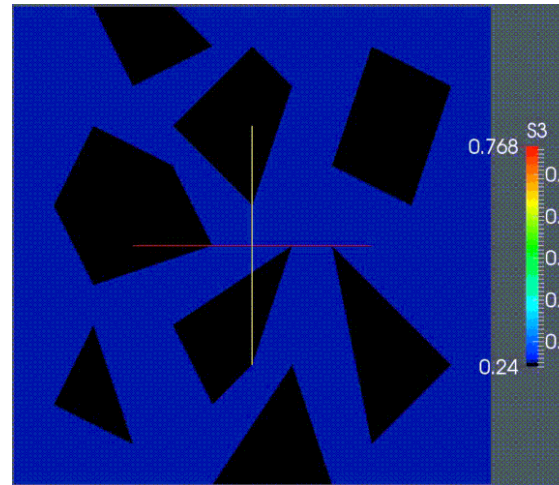


Адаптивные сетки



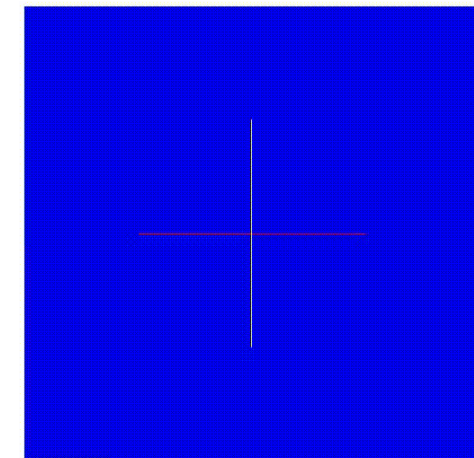
Сложная  
ГЕОЛОГИЯ

24 Сентября 2018



Экстремальная неоднородность

Russian Supercomputing Days '18



Трещины

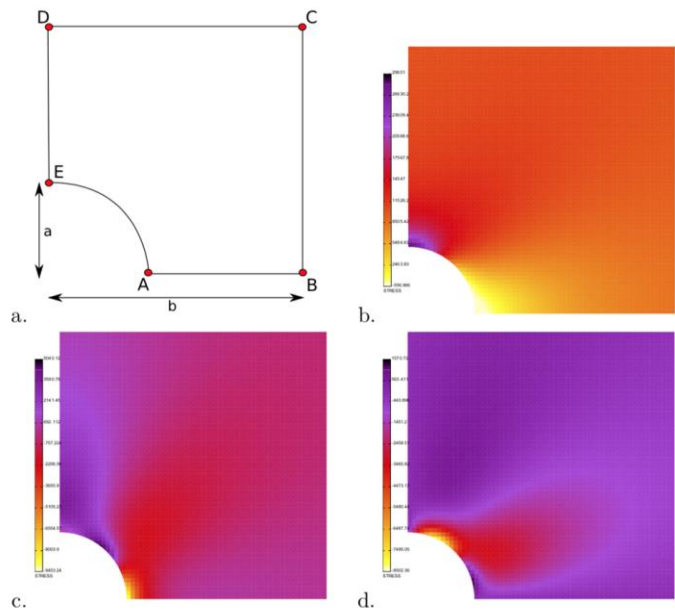


# Механика деформируемых тел

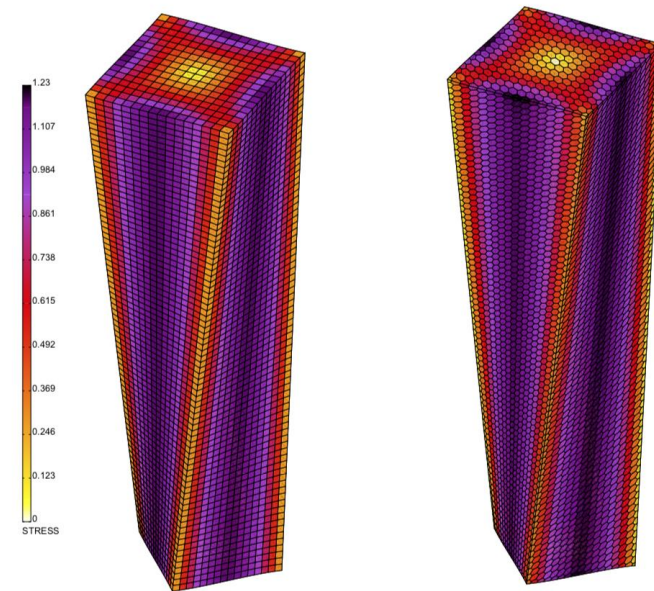
Неизвестные:  $u, v, w$

Уравнения:  $-\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0,$

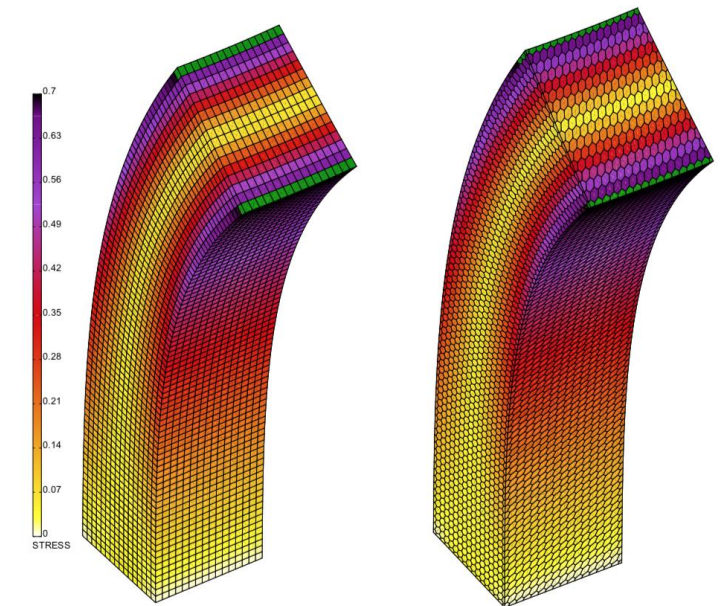
$$\mathbb{C}:\boldsymbol{\sigma} = \frac{\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T}{2}$$



Напряжения под нагрузкой



Скручивания



Сгибания





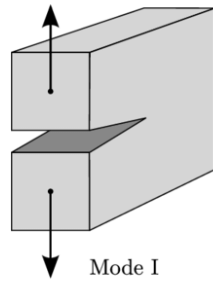
# Контактная механика

Неизвестные:  $u, v, w$

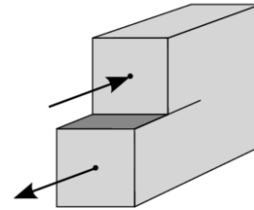
Уравнения:  $-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0,$

$$\mathbb{C}:\boldsymbol{\sigma} = \frac{\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T}{2}$$

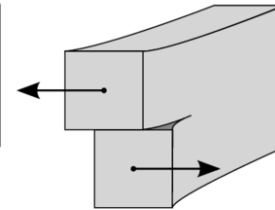
+



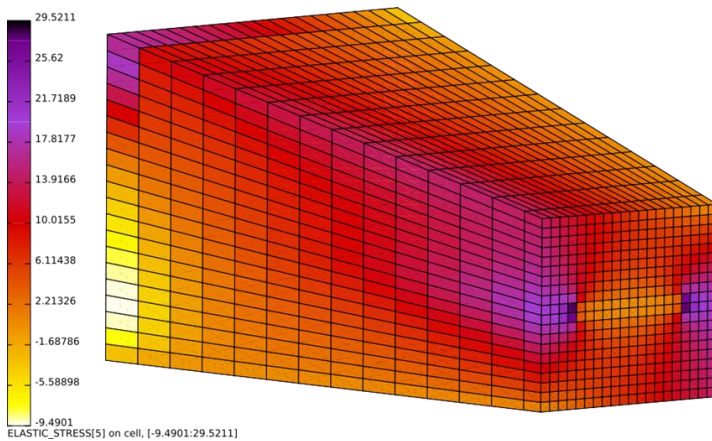
Mode I



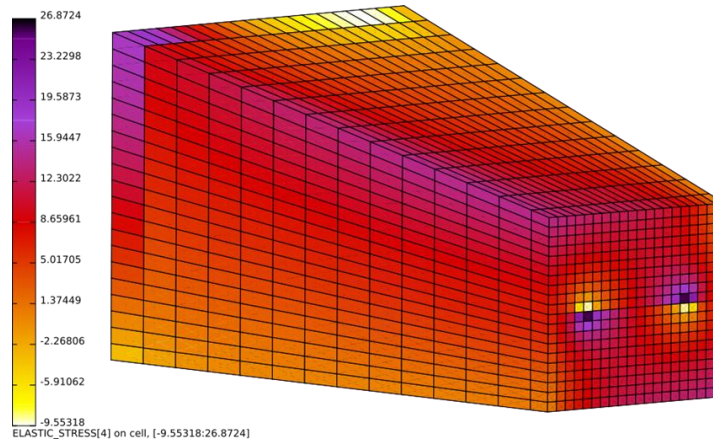
Mode II



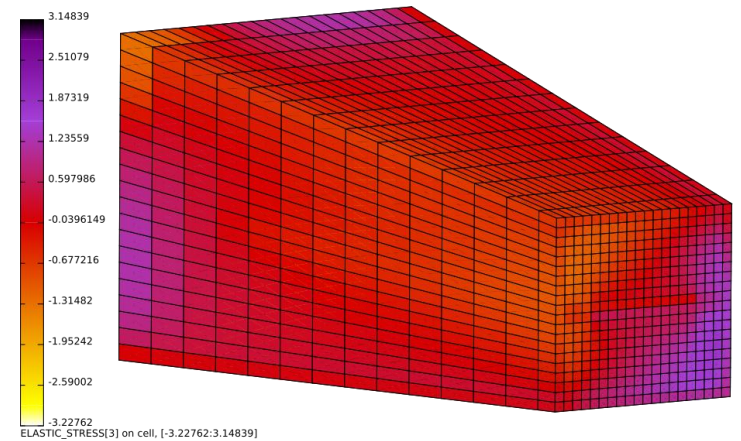
Mode III



$\sigma_{xy}$



$\sigma_{xz}$



$\sigma_{yz}$



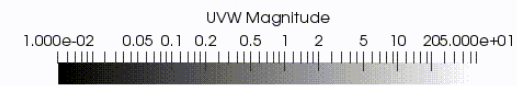
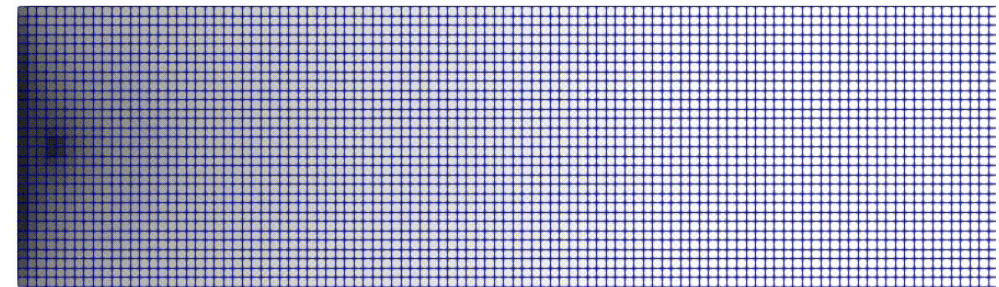
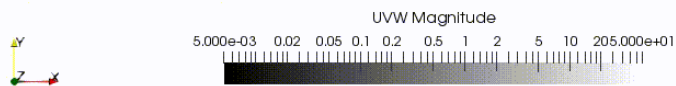
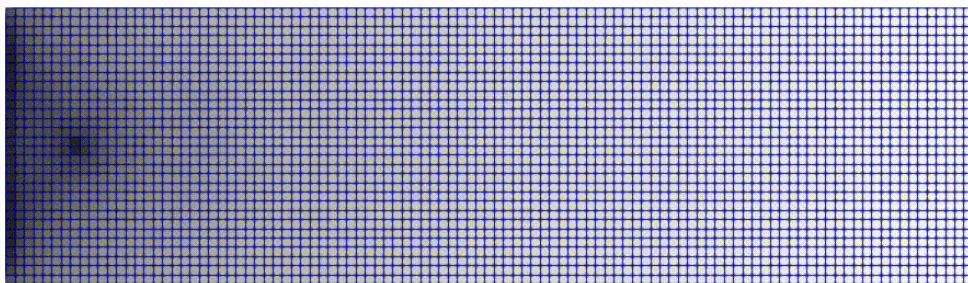
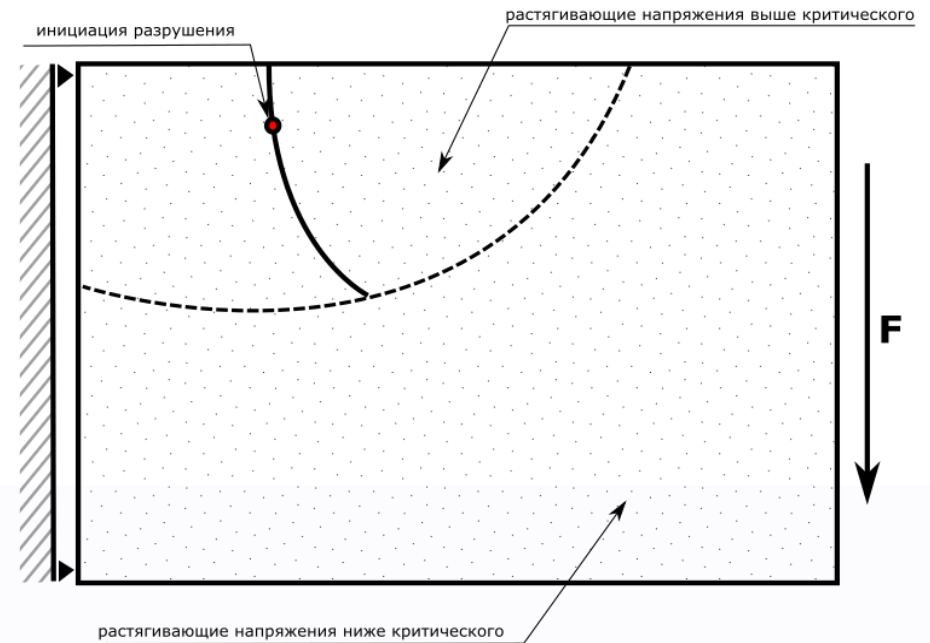
# Механика разрушения

Неизвестные:  $u, v, w$

Уравнения:  $-\text{div}(\sigma) = 0,$

$$C: \sigma = \frac{\nabla u + \nabla u^T}{2}$$

+





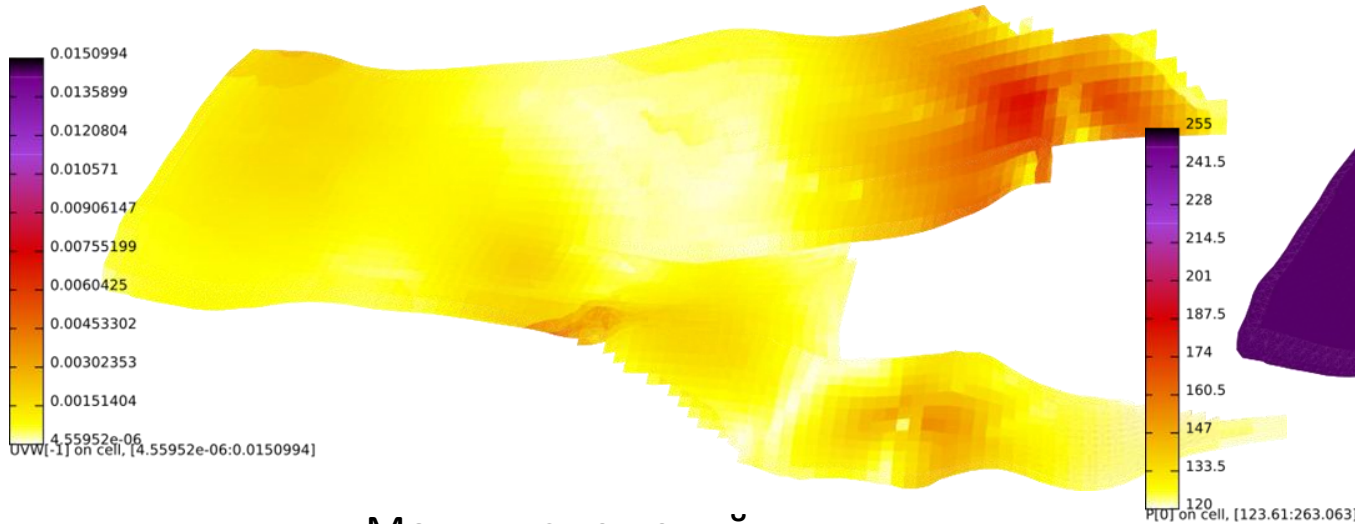


# Геомеханика

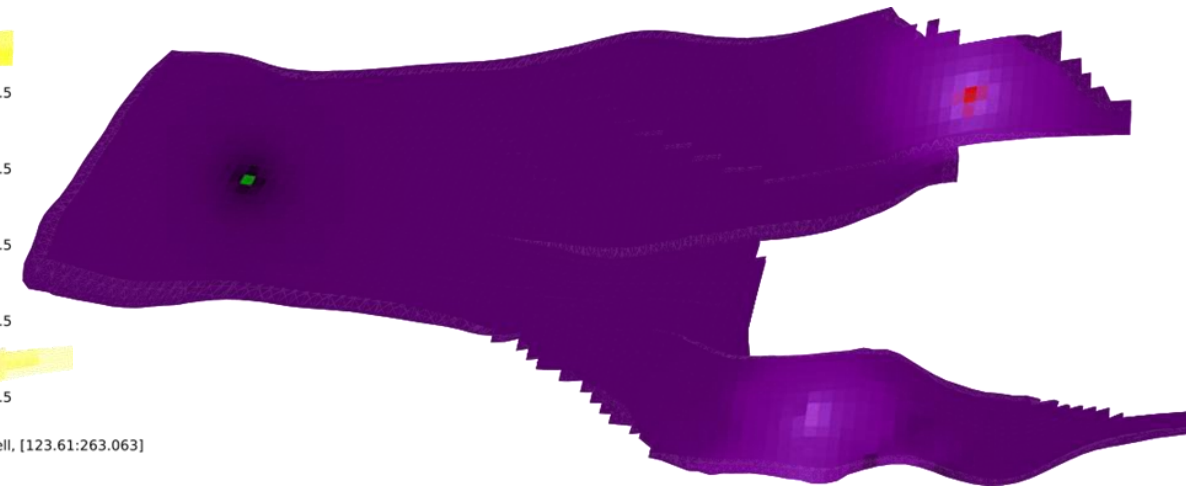
Неизвестные:  $u, v, w, p$

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

Данные с месторождения Норна



Модуль смещений



Поле давлений



# Захоронение ядерных отходов

- Требуется прогноз на **тысячу лет**
- Определить зону заражения рек и подземных вод
- Определить степень воздействия на человека



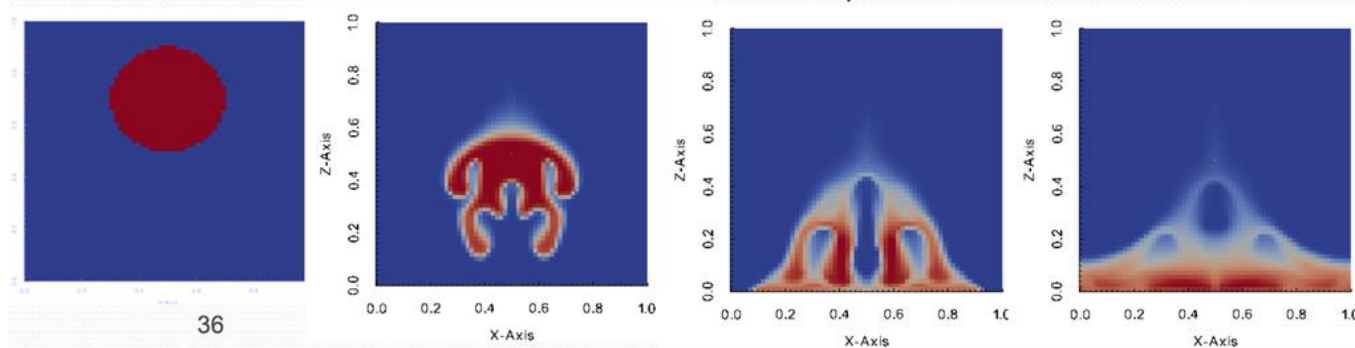


# Захоронение ядерных отходов

Расчетный код GeRa для Росатома на промышленном уровне. Использует INMOST для генерации и параллельной работы с сетками, решения систем линейных уравнений.

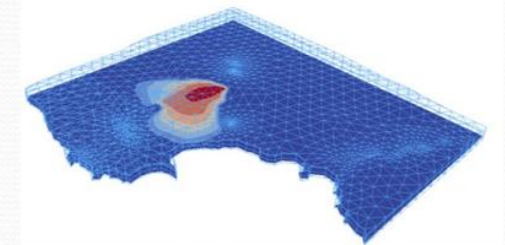
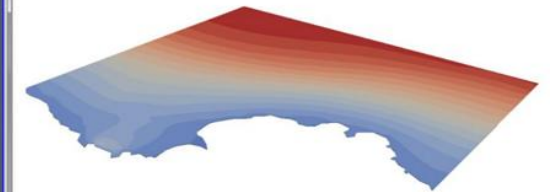
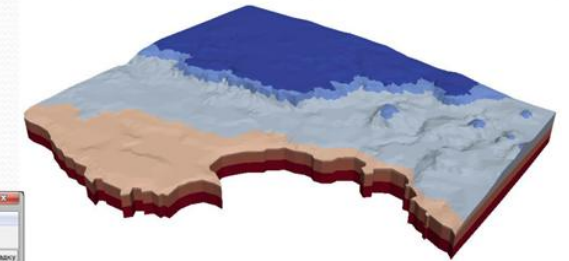
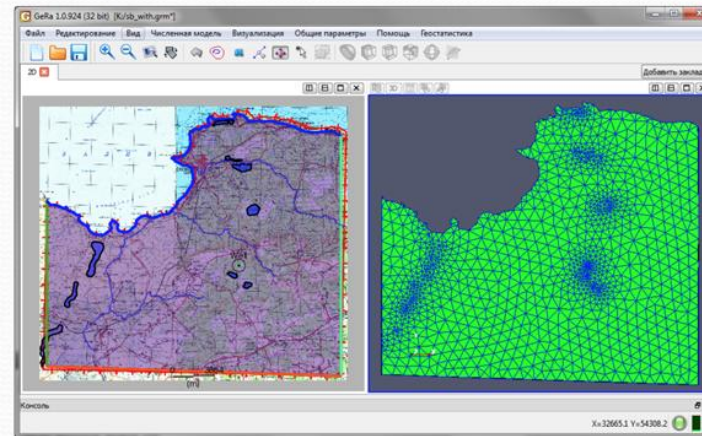
## Физика:

- Многофазная фильтрация
- Плотностная конвекция
- Цепочки ядерных реакций
- Сорбция
- Химия
- Биология
- ...



Плотностная конвекция

Интерфейс программы

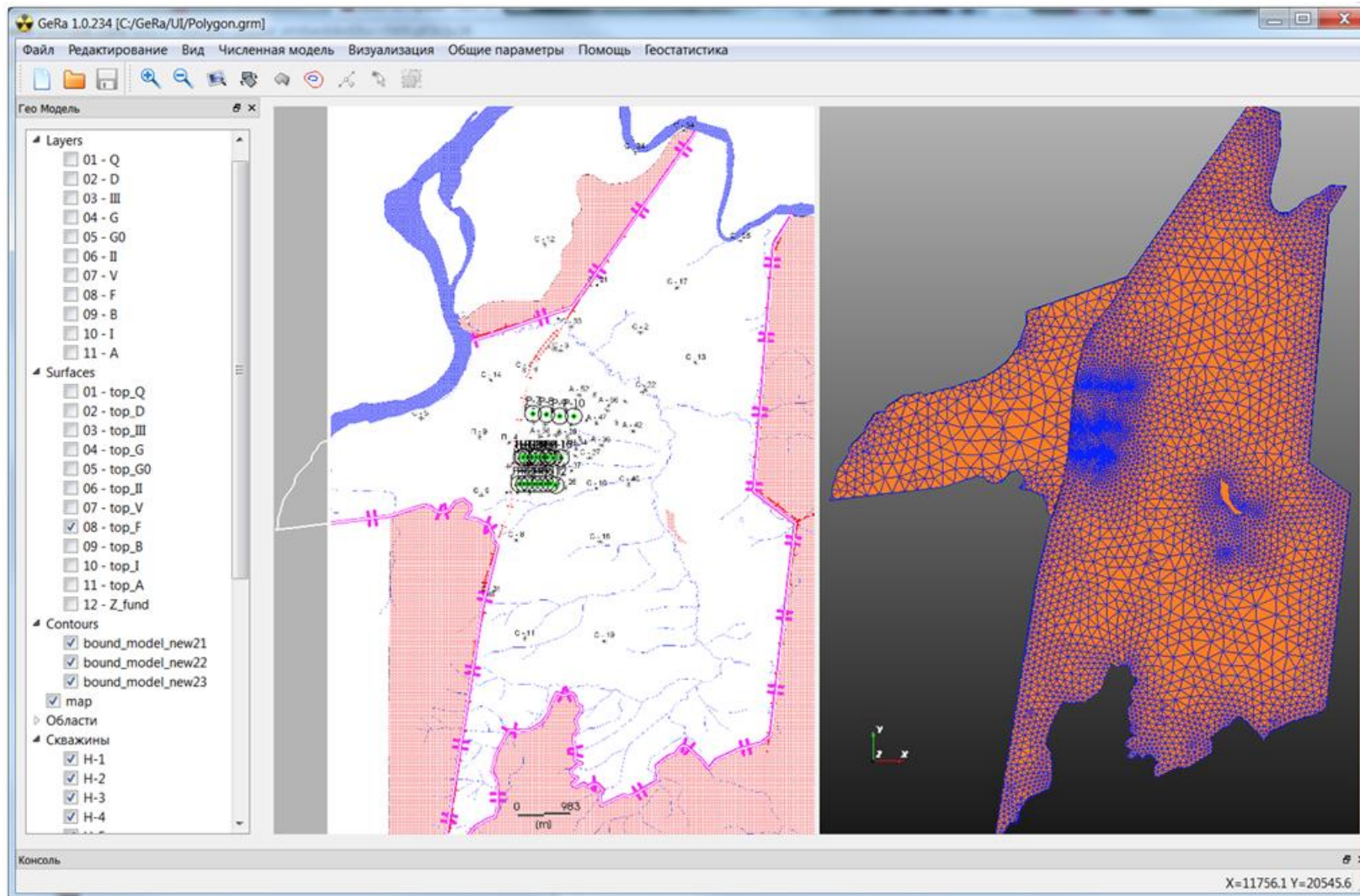


Результат моделирования





# Захоронение ядерных отходов



**Спасибо за внимание!**

**КОНТАКТЫ**

- [KIRILL.TERENOV@GMAIL.COM](mailto:KIRILL.TERENOV@GMAIL.COM)
- [YURI.VASSILEVSKI@GMAIL.COM](mailto:YURI.VASSILEVSKI@GMAIL.COM)

**ССЫЛКИ**

- [WWW.INMOST.ORG](http://WWW.INMOST.ORG)

