



Платформа **INMOST** для распределенного математического моделирования

Кирилл Терехов¹, Игорь Коньшин^{1,2}, Юрий Василевский^{1,3,4}

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

²Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Российской Академии Наук

³Московский Физико-Технический Институт

⁴Сеченовский Университет

**Открытая конференция ИСП РАН им. В.П. Иванникова
22 ноября, 2018**



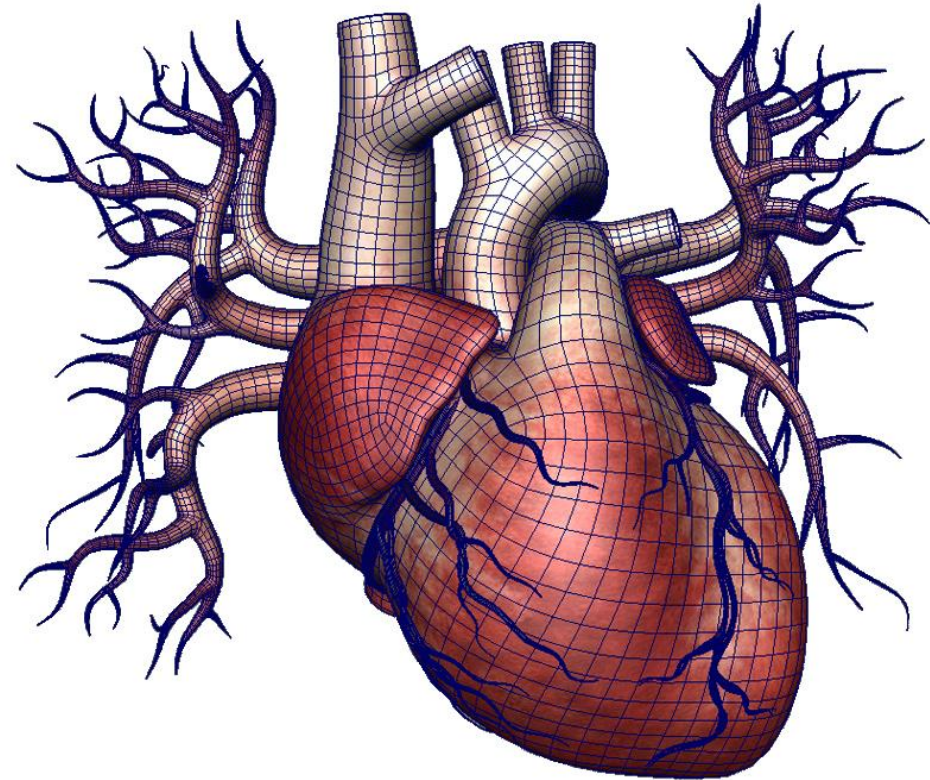
Математическое моделирование

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

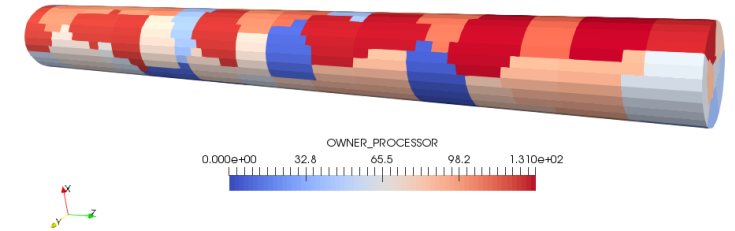




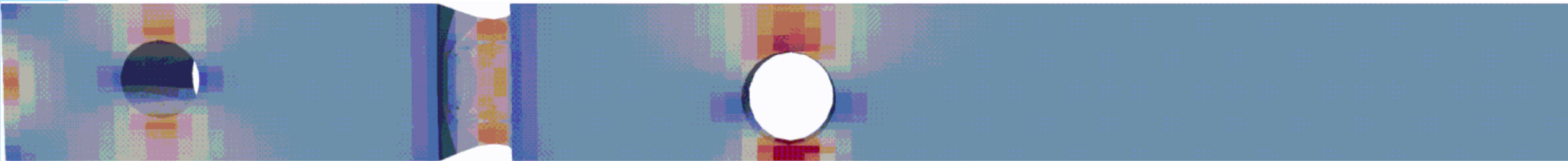
Несжимаемая жидкость

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



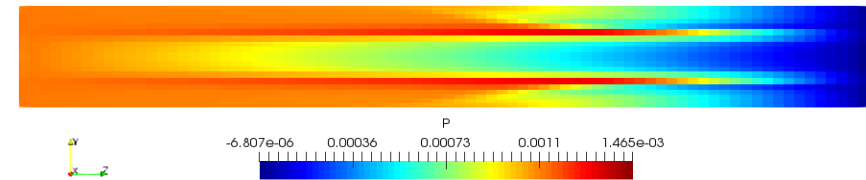
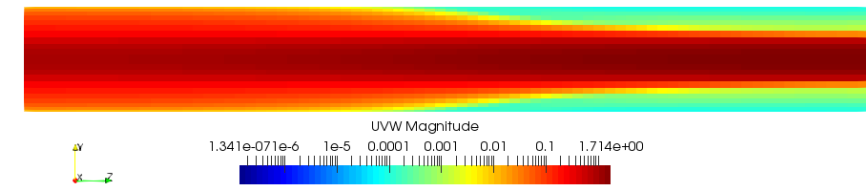
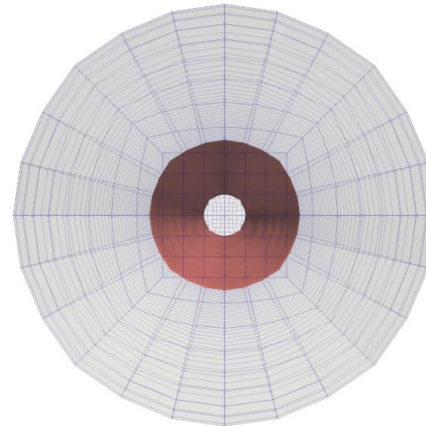
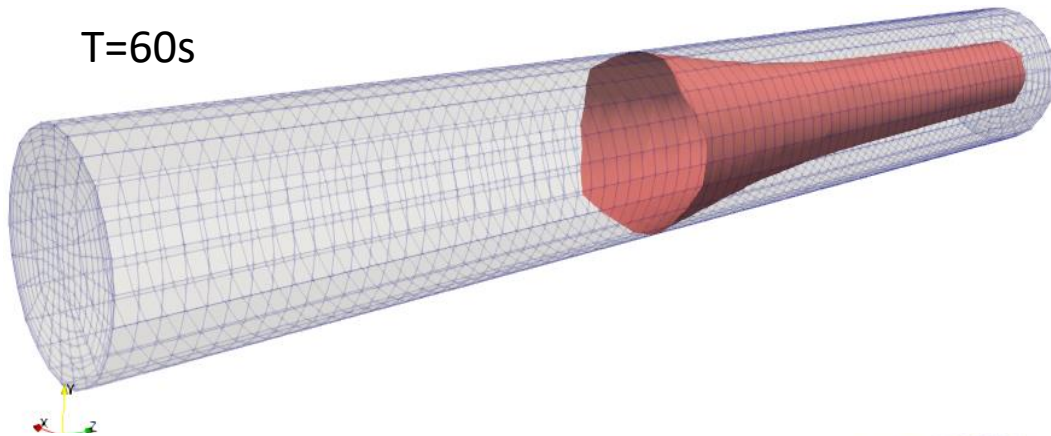


Моделирование свертываемости крови

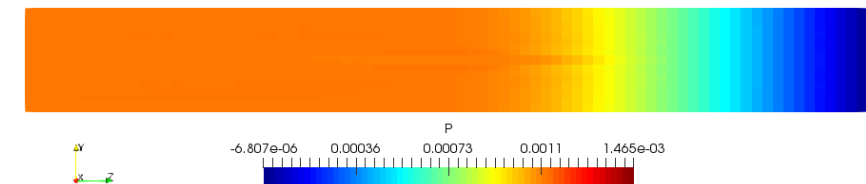
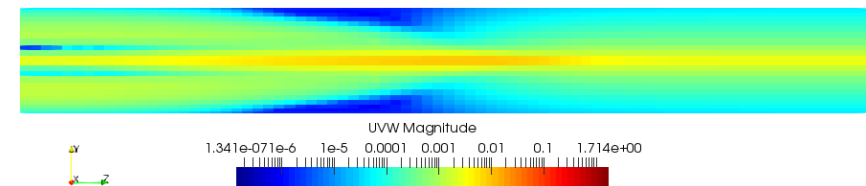
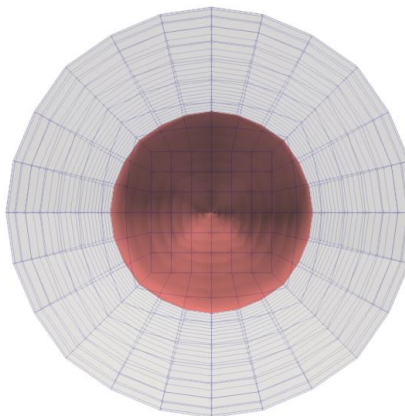
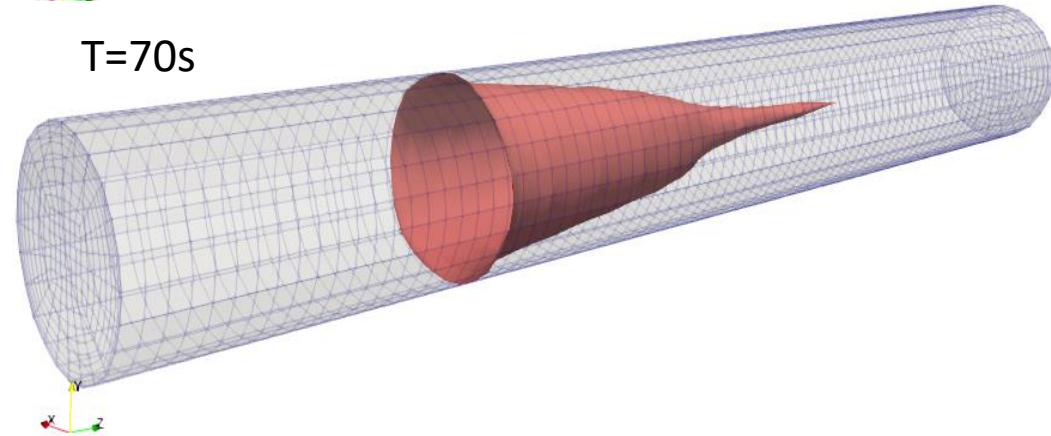
Неизвестные: $u, v, w, p, PT, T, A, Va, F, Fr, Fg, \varphi_f, \varphi_c$

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

T=60s



T=70s

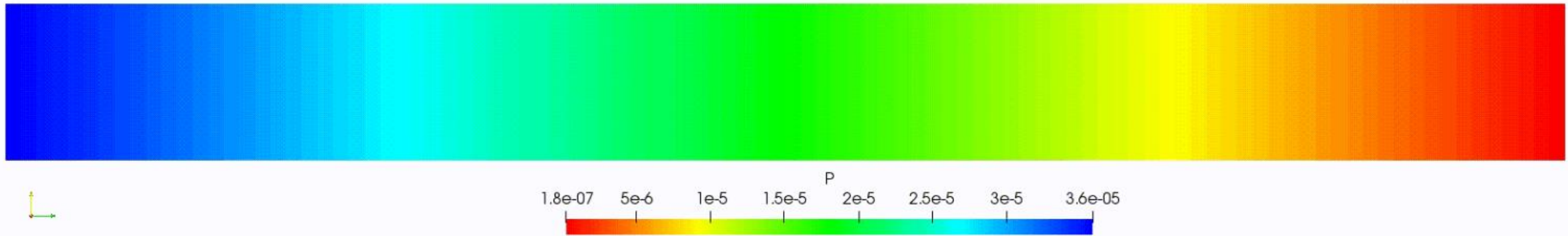




Моделирование образования тромба

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



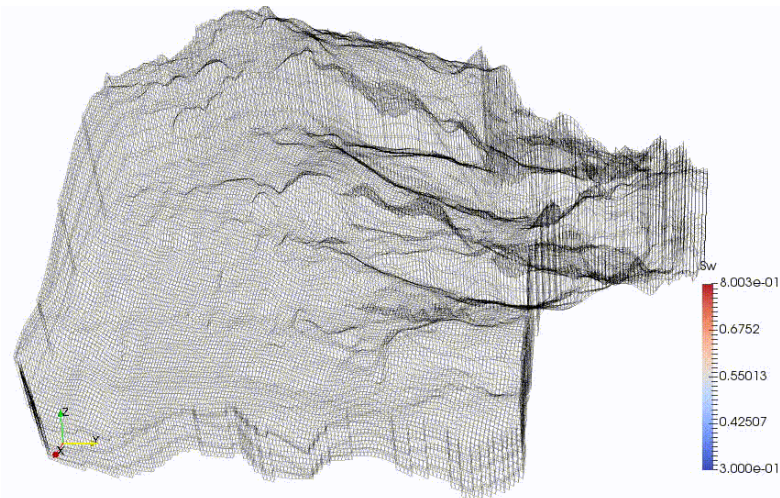
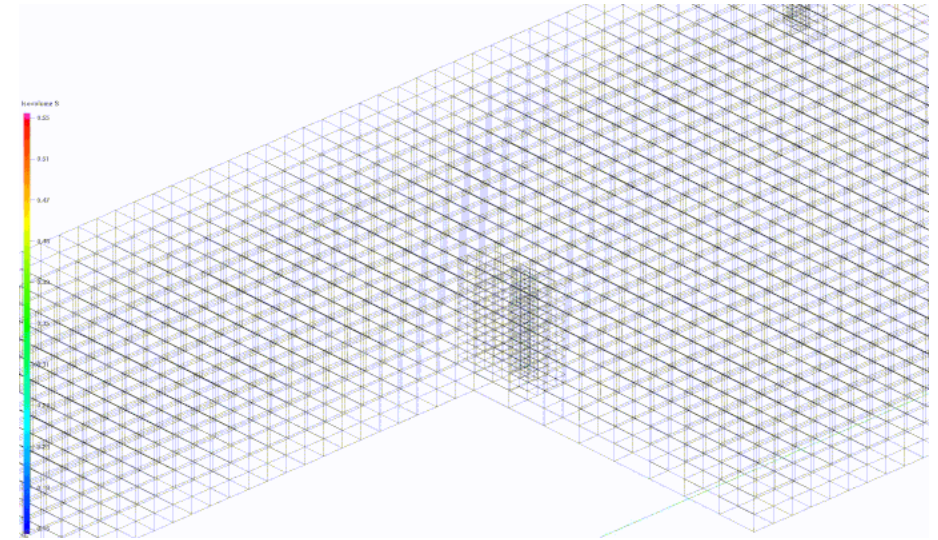


Нефть и газ

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

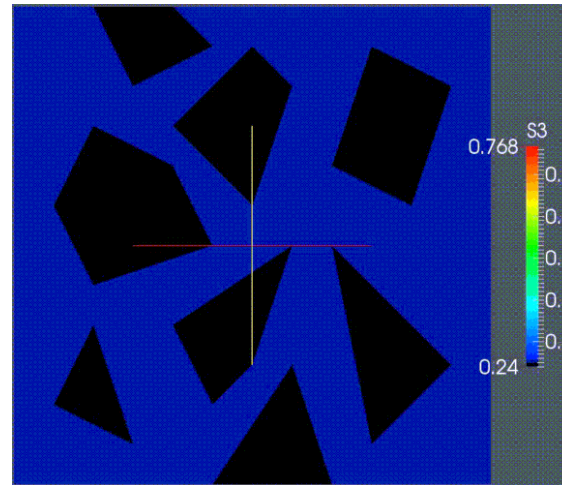
Уравнения:

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



Сложная геология

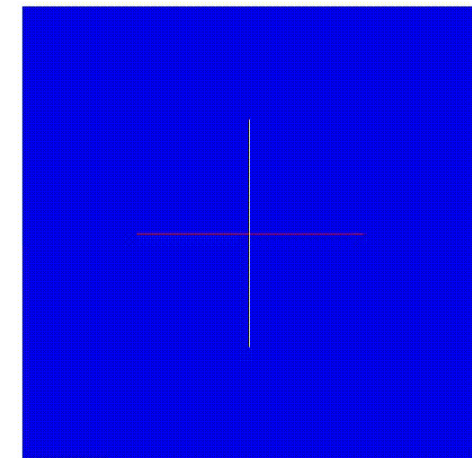
22 Ноября 2018



Экстремальная неоднородность

ISPRASOPEN

Адаптивные сетки



Трещины

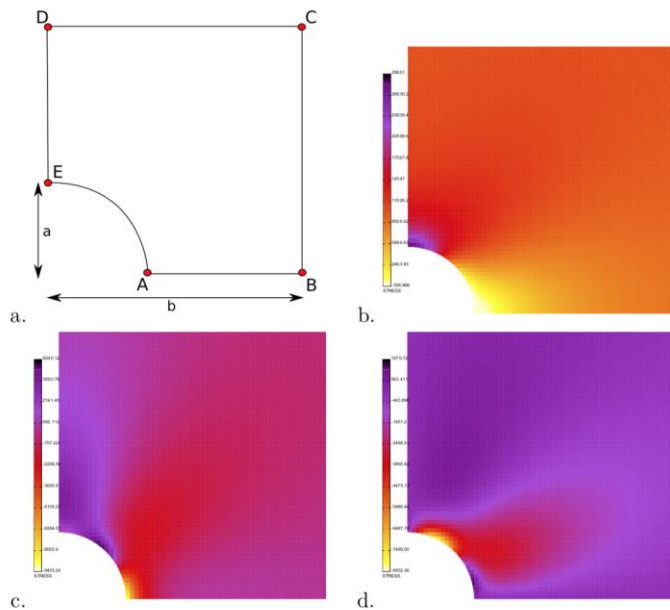


Механика деформируемых тел

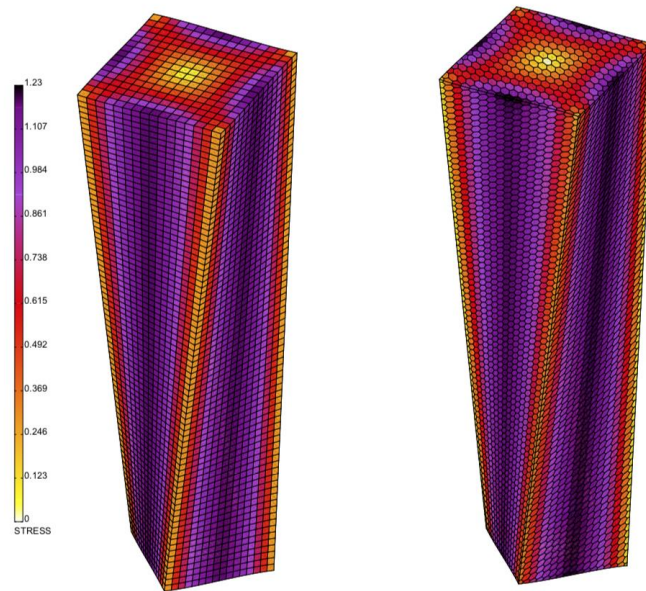
Неизвестные: u, v, w

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

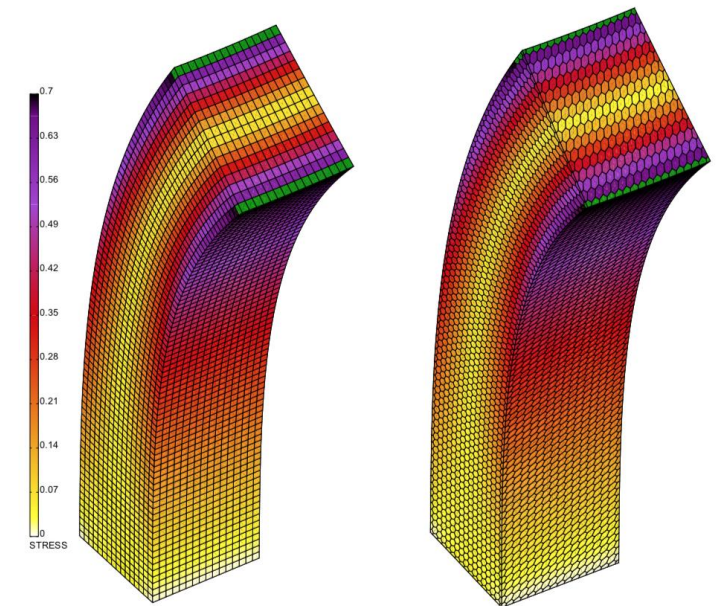
$$\mathbb{C}:\boldsymbol{\sigma} = \frac{\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T}{2}$$



Напряжения под нагрузкой



Скручивания



Сгибания



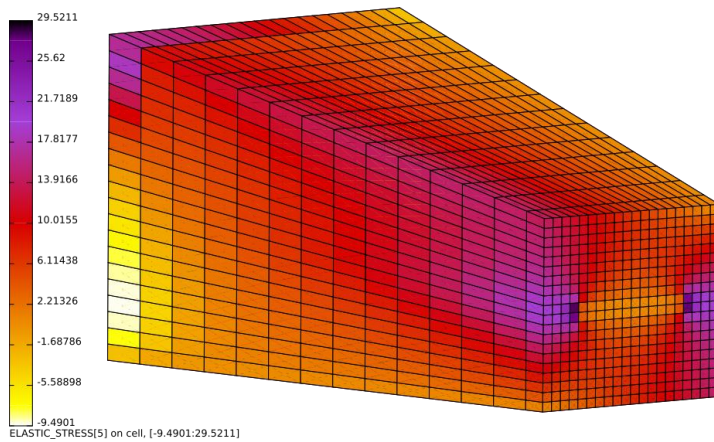
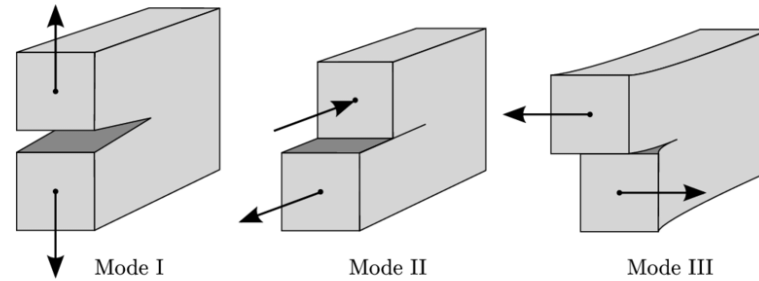
Контактная механика

Неизвестные: u, v, w

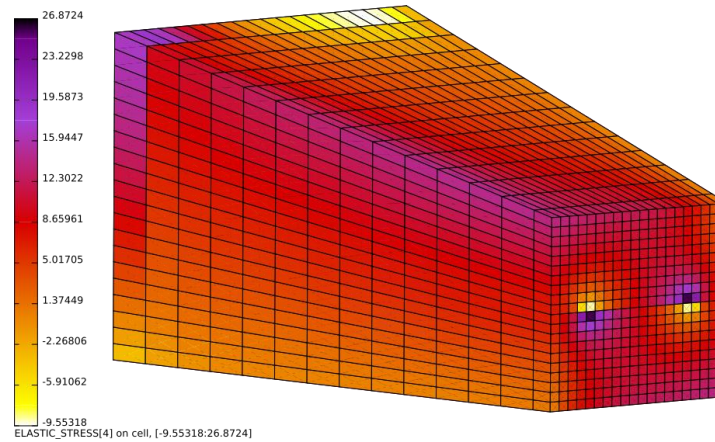
Уравнения: $-\text{div}(\sigma) = 0,$

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

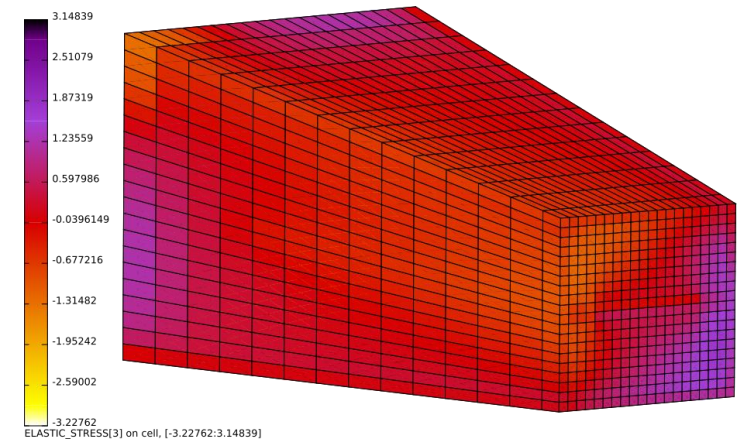
+



σ_{xy}



σ_{xz}



σ_{yz}



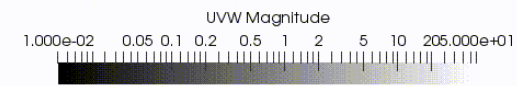
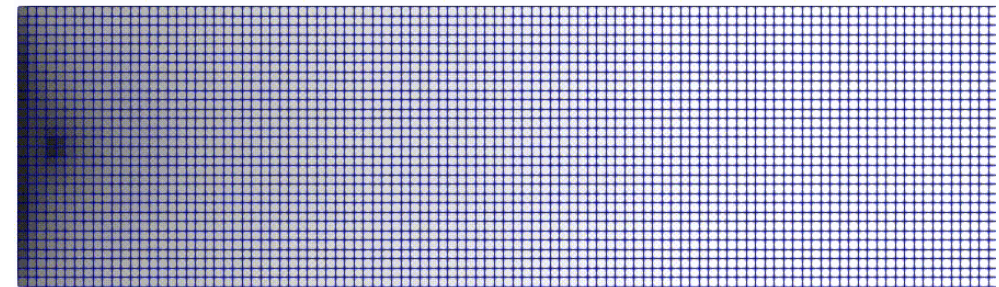
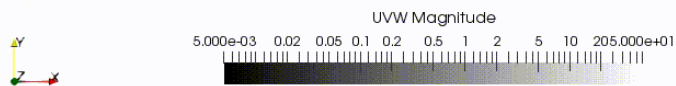
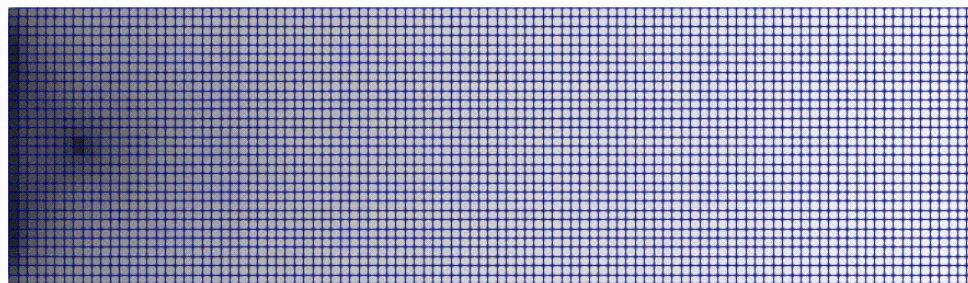
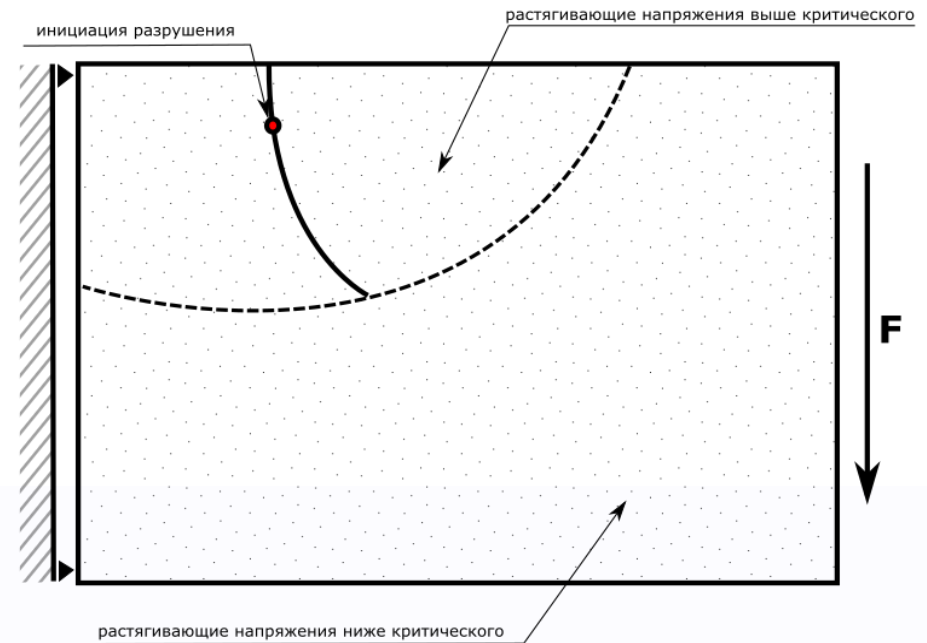
Механика разрушения

Неизвестные: u, v, w

Уравнения: $-\text{div}(\sigma) = 0,$

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

+



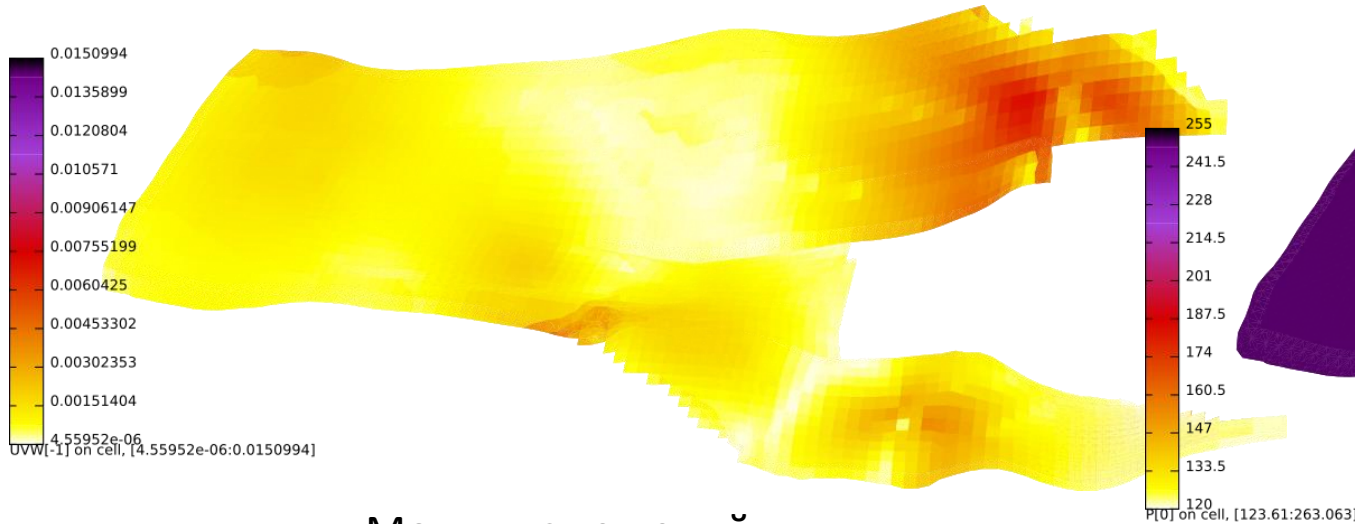


Геомеханика

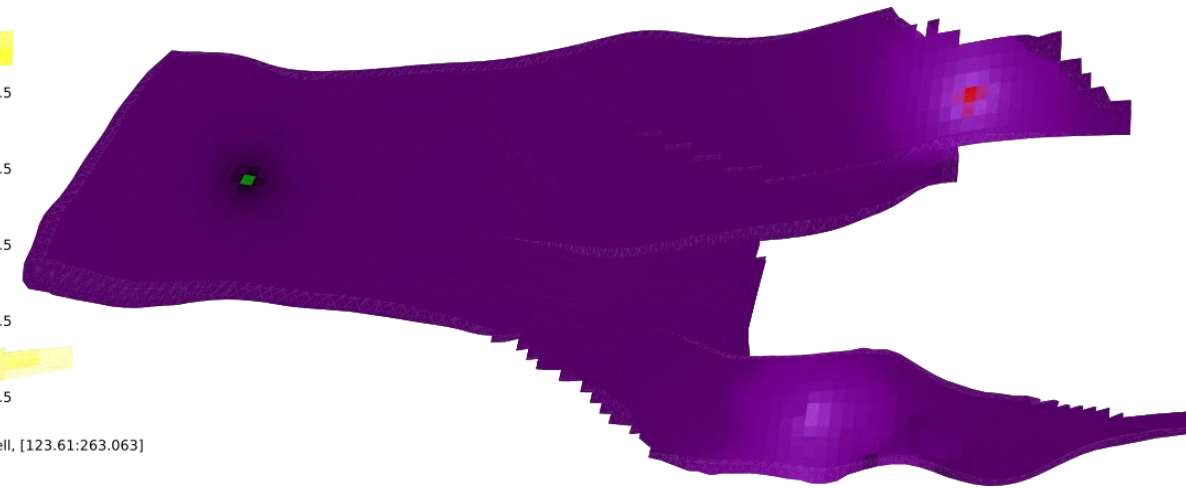
Неизвестные: u, v, w, p

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

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



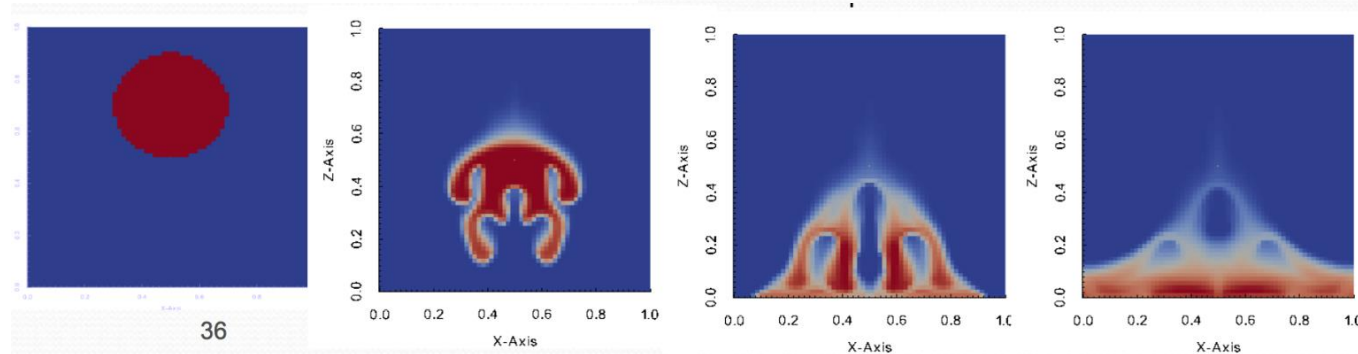


Захоронение ядерных отходов

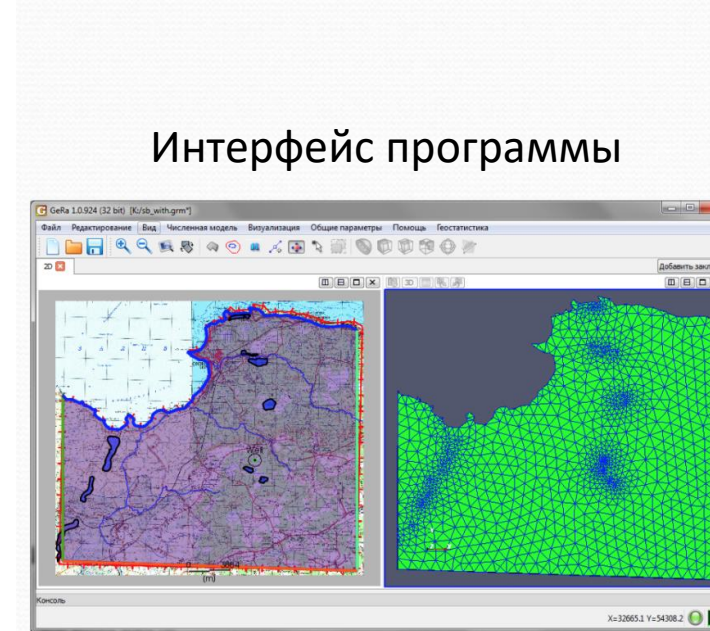
Расчетный код GeRa для Росатома на промышленном уровне. Использует INMOST для генерации и параллельной работы с сетками, решения систем линейных уравнений.

Физика:

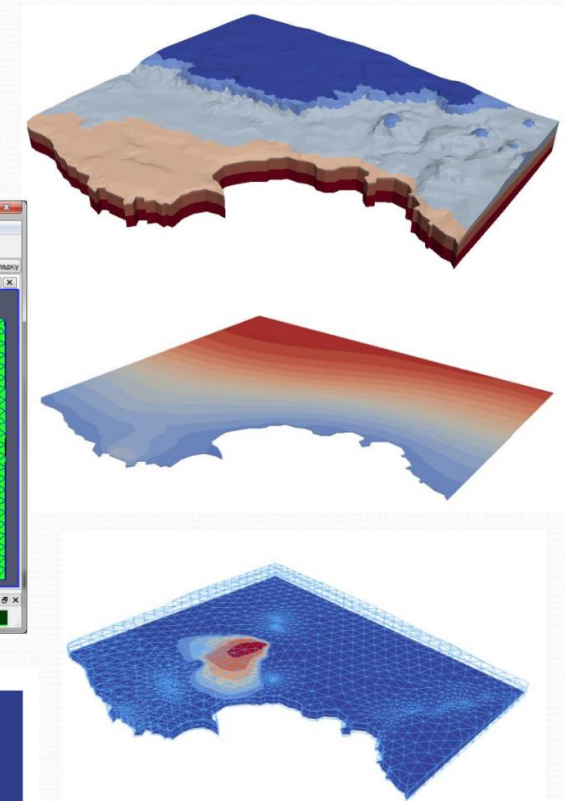
- Многофазная фильтрация
- Плотностная конвекция
- Цепочки ядерных реакций
- Сорбция
- Химия
- Биология
- ...



Плотностная конвекция



Интерфейс программы



Результат моделирования



INMOST

обзор функционала



Что такое INMOST?

● **INMOST** аббревиатура:

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

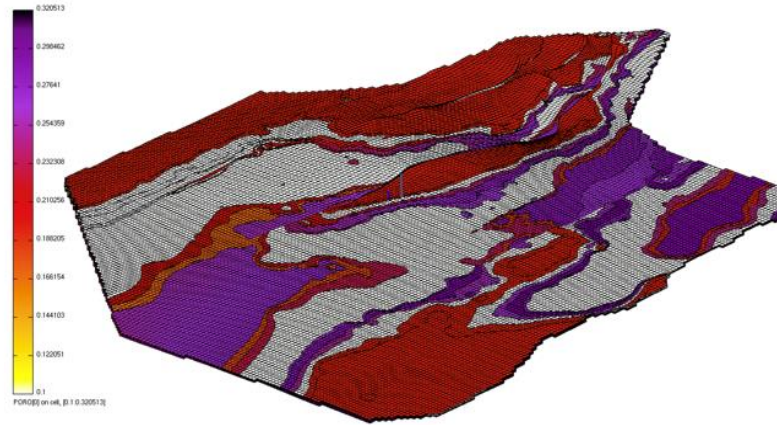
● Первая тестовая версия появилась в 2012 г. во время стажировки в ExxonMobil



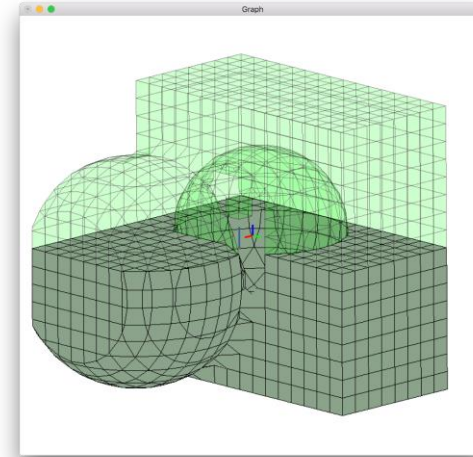
INMOST: поддержка сеток



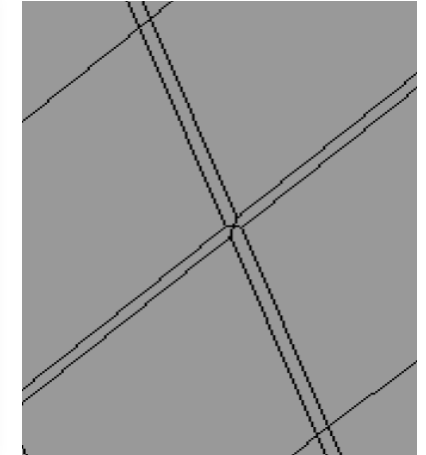
Модель
человеческого тела



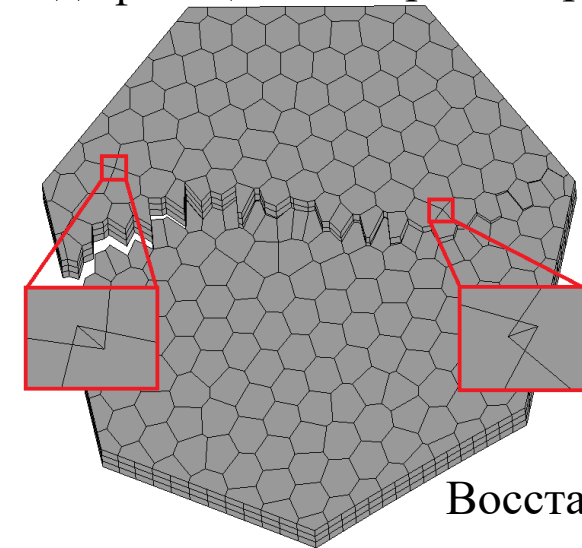
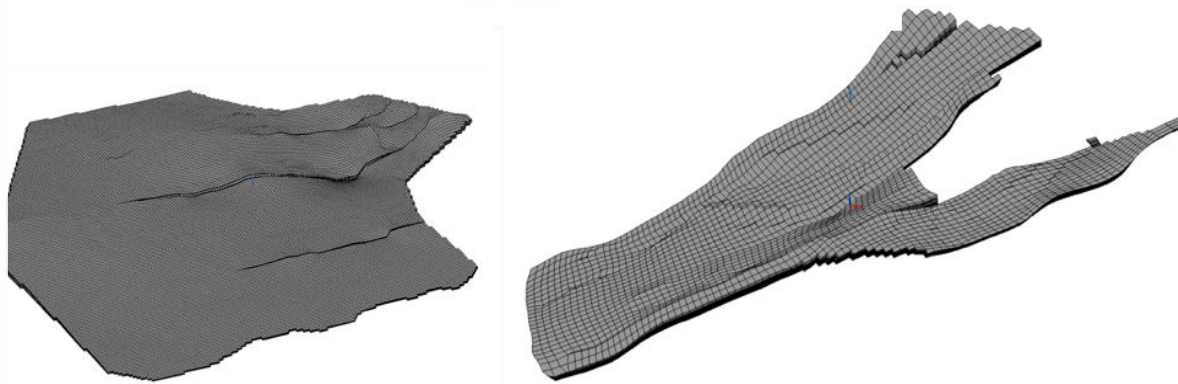
Геологические сетки с выклиниванием,
поддержка входных данных коммерческих
симуляторов нефти и газа



Сложные модификации



Вскрытие трещин



Восстановление
сеток

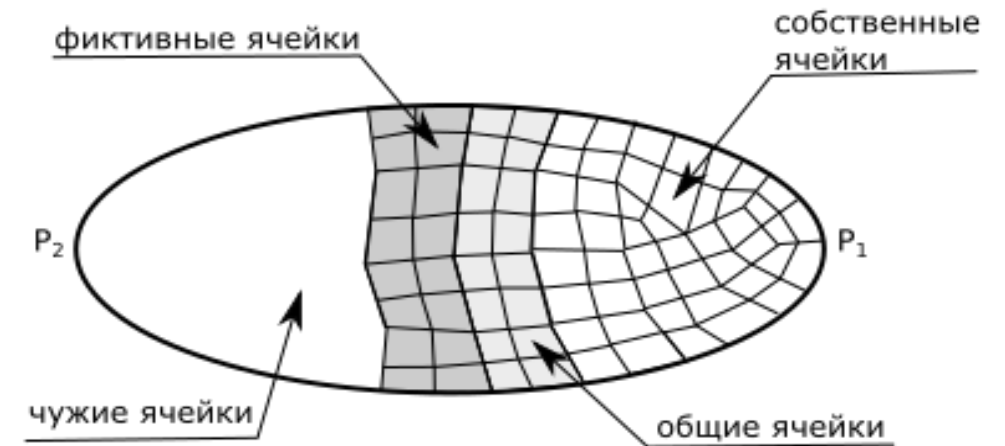


INMOST: декомпозиция области

- 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

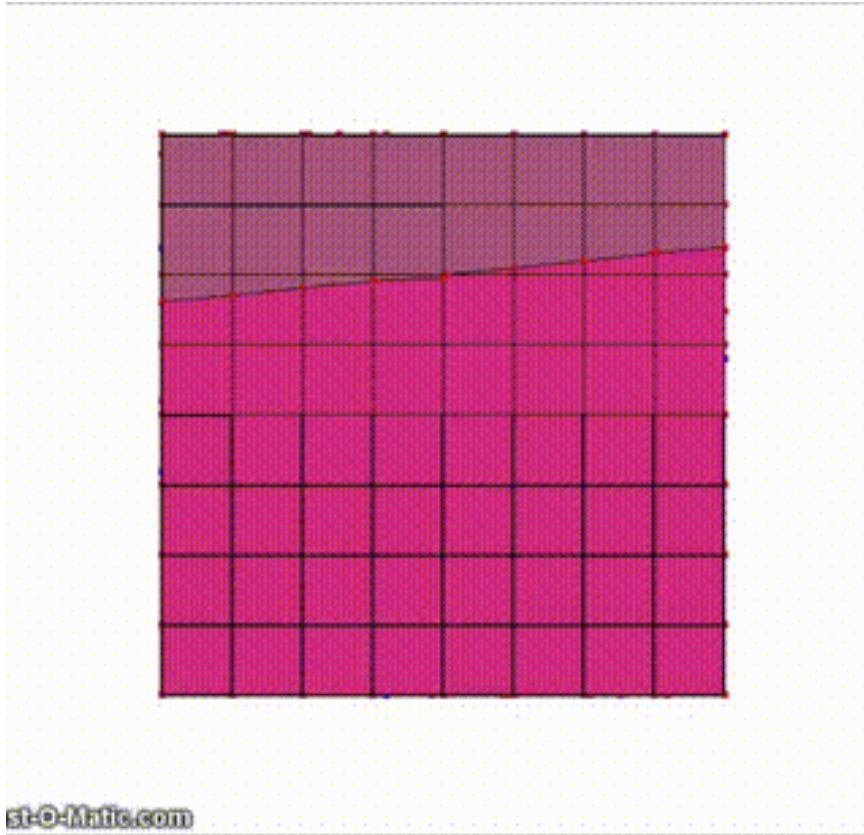


Пример декомпозиции области на 64 процессора

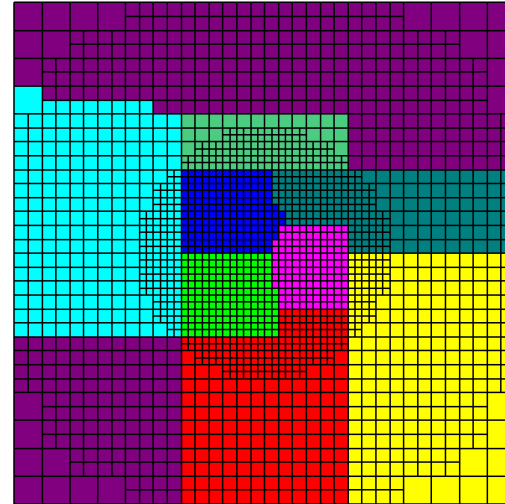




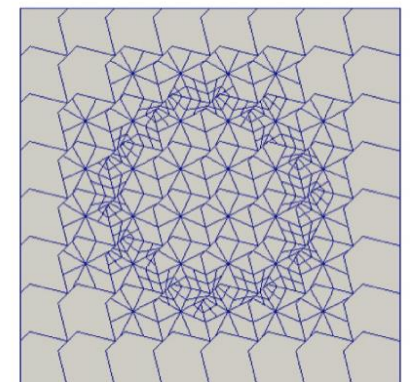
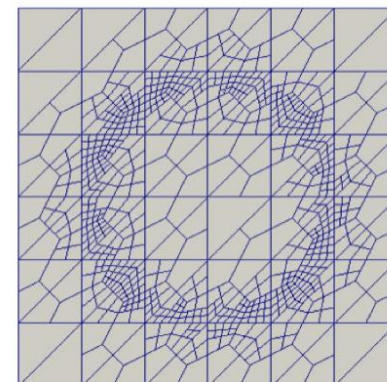
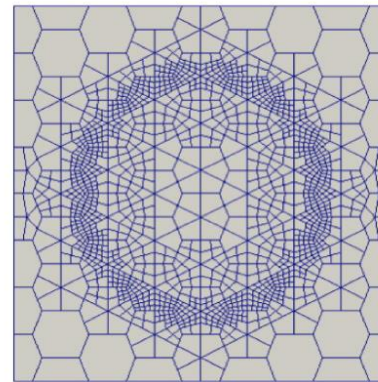
INMOST: поддержка динамических сеток



Встроенный пример **OctreeCutcell**



Параллельная масштабируемая адаптация и балансировка сетки

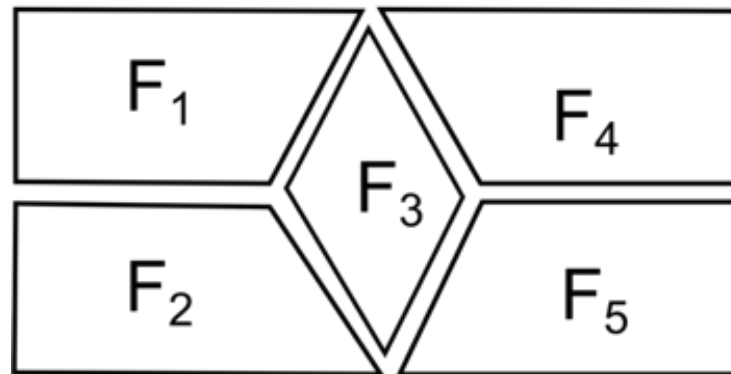
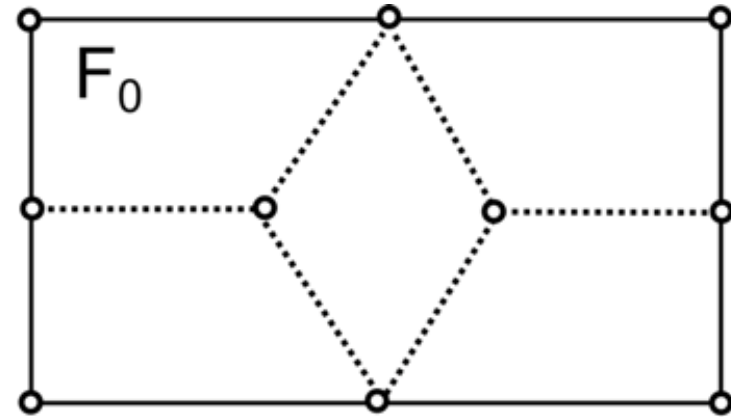


Пример **AdaptiveMesh** для адаптации сеток общего вида



INMOST: поддержка динамических сеток

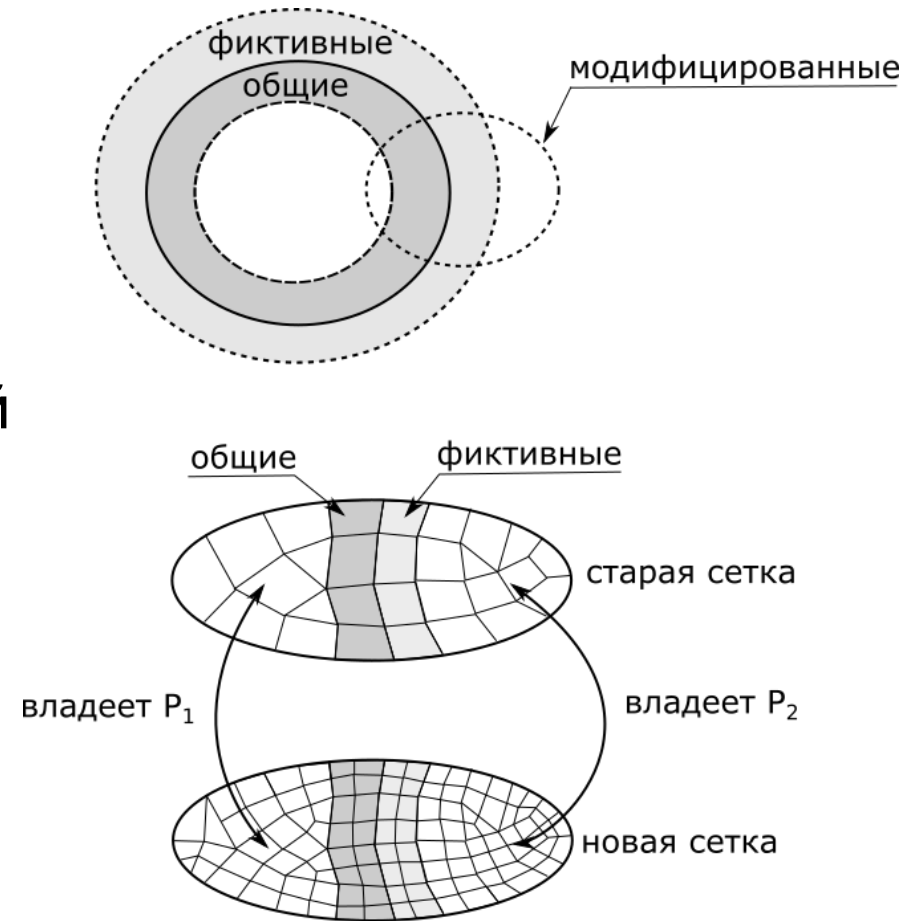
- Можно отсоединять и **удалять** элементы, а затем **создавать** новые
- Вспомогательный функционал:
 - **разделить** ребро по узлам
 - **разделить** грань по ребрам
 - **разделить** ячейку по граням
 - **объединить** элементы





INMOST: поддержка динамических сеток

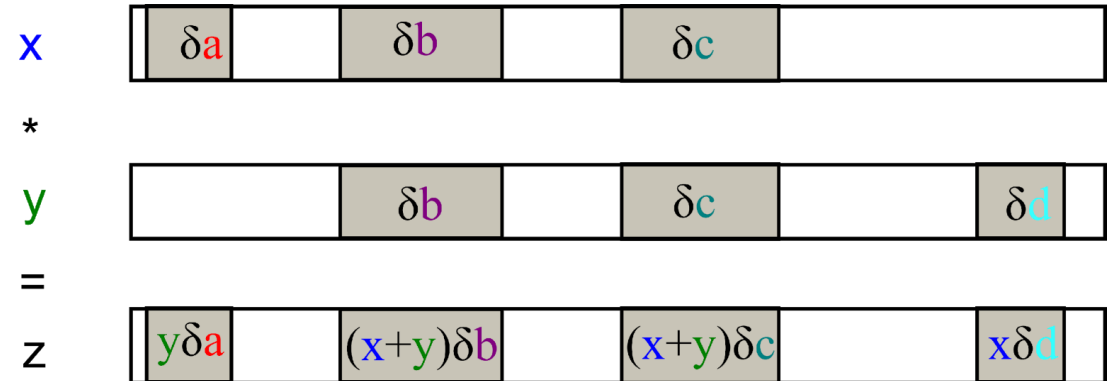
- Сетку можно перевести в режим **модификации**:
 - удаленные элементы и их данные **остаются** до окончания модификации
 - можно переключиться между старой и новой сеткой для **переноса данных**
 - разметка принадлежности элементов, необходимо для обменов данными
 - восстановление фиктивных слоев





INMOST: авто-дифференцирование

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



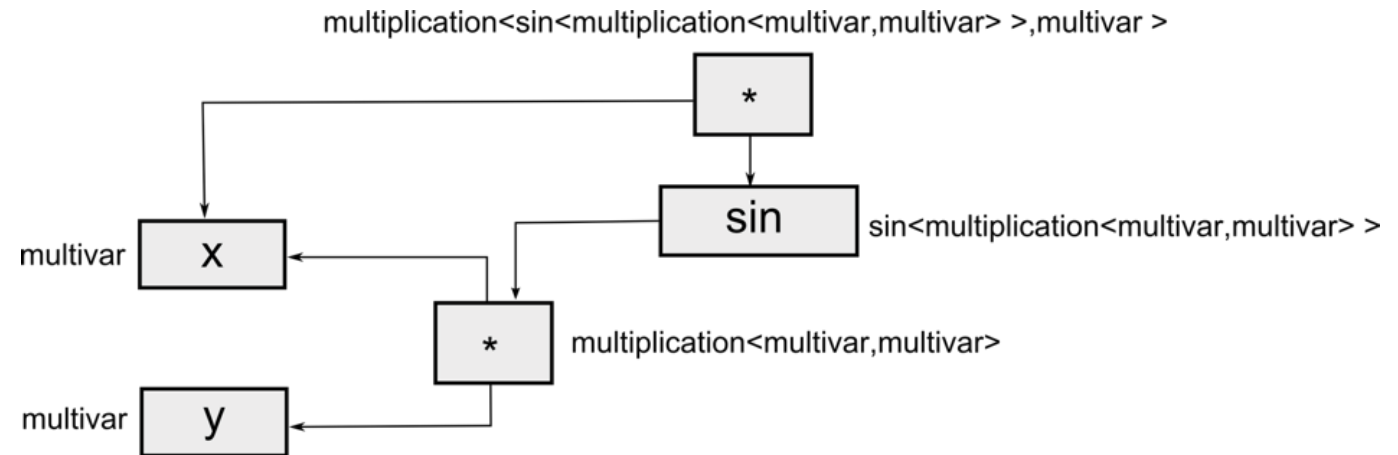
$$x\{\partial a + \partial b + \partial c\} * y\{\partial b + \partial c + \partial d\} = x * y\{y\partial a + (x+y)\partial b + (x+y)\partial c + x\partial d\}$$



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)
```

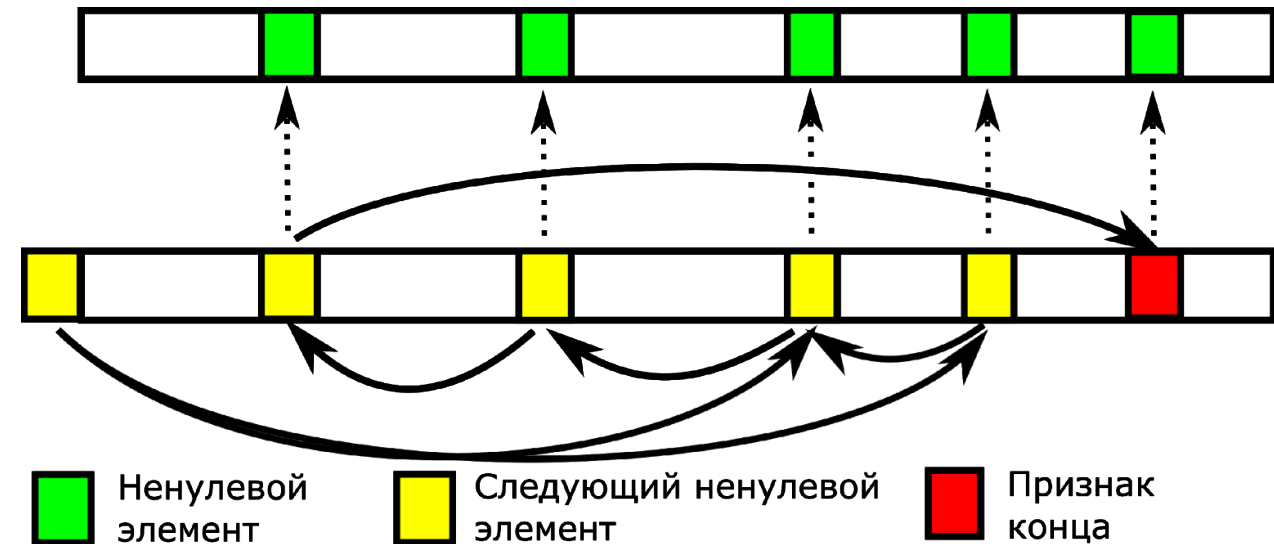


внутреннее представление выражения $x*\sin(x*y)$



INMOST: авто-дифференцирование

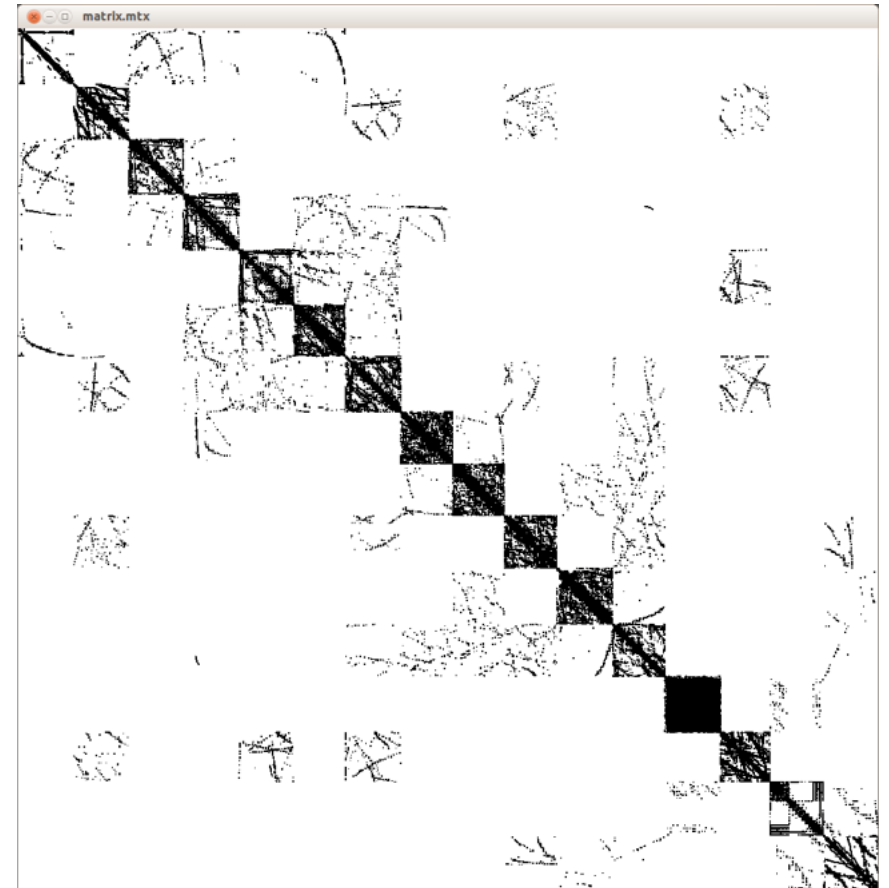
- Основные операции:
 - **сложение** разреженных векторов
 - **умножение** на число
- **Быстрый** метод сложения из ILU предобуславливателей:
 - массив значений
 - массив указателей на ненулевой элемент
 - вставка $O(1)$, запрос $O(1)$
- Взаимодействие с **сеткой**:
 - хранение **данных** с производными
 - 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(τ, τ^2) и Crout-ILU(τ, τ^2) второго порядка
 - Максимизация произведения на диагонали
 - Минимизация заполнения
 - Масштабирование в дважды-стохастический вид или I-доминирование
 - Динамический подбор τ по числу обусловленности LU
 - Многоуровневое вычисление дополнения по Шуру
 - Выбор строки с максимальным ведущим элементом по диагонали или по 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



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**



Разработка

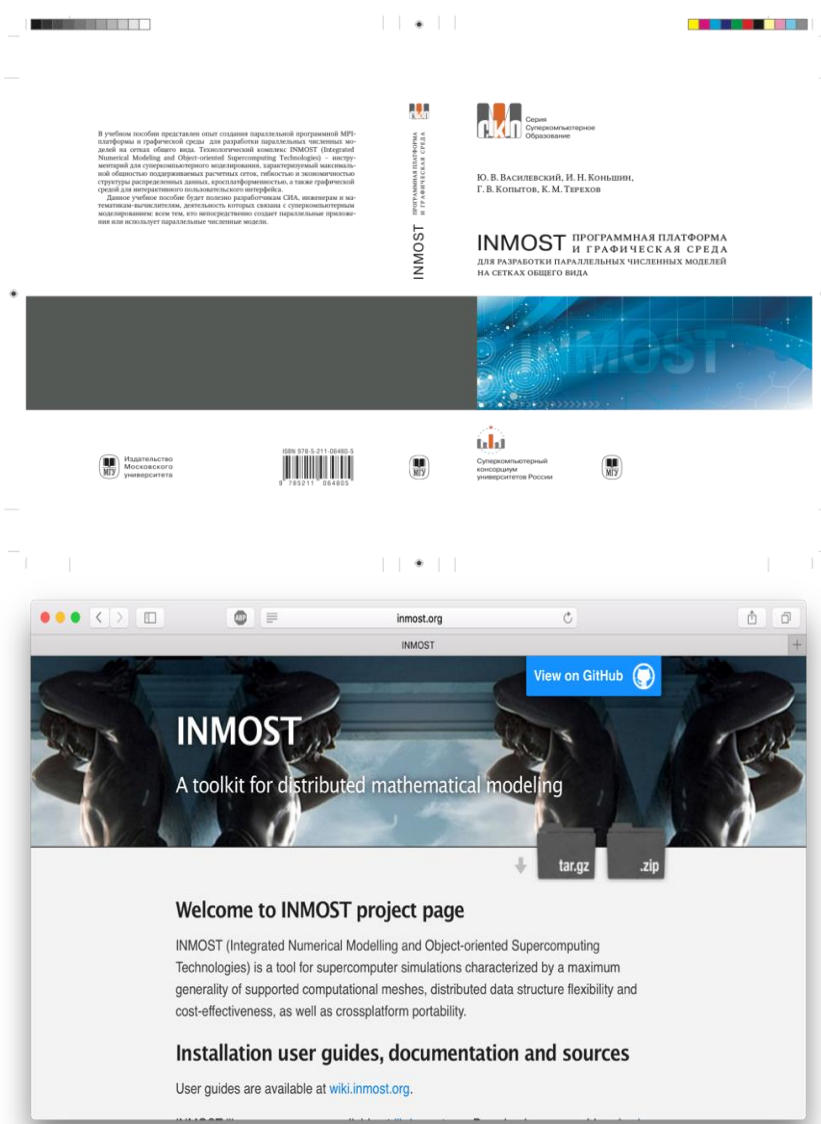
- Дальнейшее развитие:
 - Модули INMOST:
 - поддержка мультифизики
 - работы с геометрией области
 - работы с сеточными генераторами
 - визуализации
 - Детальная документация
 - Книга по конечным объемам с издательством Springer





ССЫЛКИ

- Проект с открытым исходным кодом
 - Поддерживается
 - Платформо-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>



Спасибо за внимание!

КОНТАКТЫ

- KIRILL.TERENOV@GMAIL.COM
- YURI.VASSILEVSKI@GMAIL.COM
- IGOR.KONSHIN@GMAIL.COM

ССЫЛКИ

- WWW.INMOST.ORG

