

# Применение программной платформы INMOST при моделировании задач фильтрации и гидродинамики

Василевский Ю.В., Капырин И.В.,  
Коньшин И.Н., Терехов К.М.

Институт вычислительной математики РАН, ИБРАЭ РАН

НРСАcad-2015, Москва, МГУ, 25.06.2015

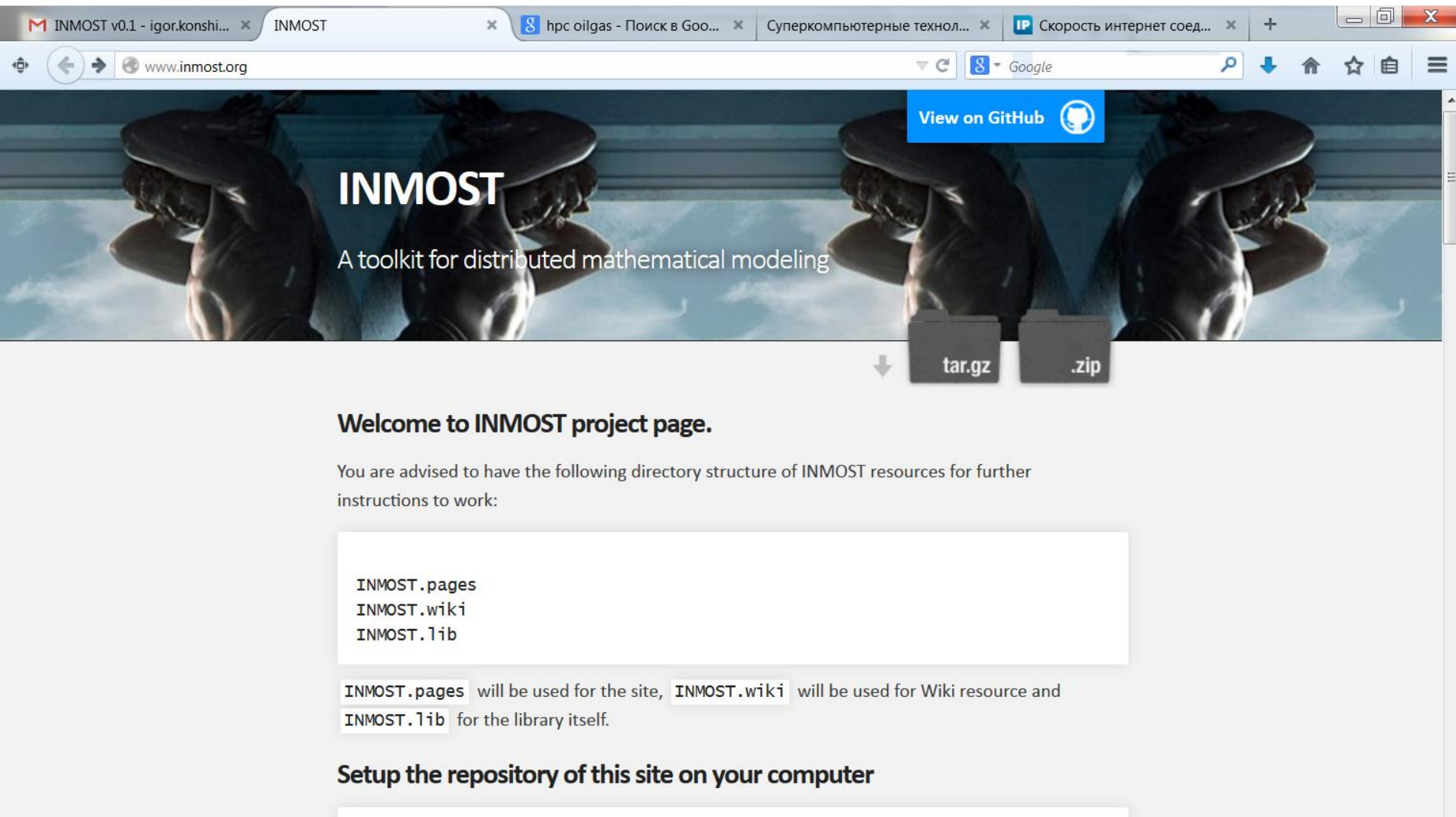
# План

- Программная платформа INMOST
- Приложение GeRa

# 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

# INMOST: [www.inmost.org](http://www.inmost.org)



The screenshot shows a browser window with the URL [www.inmost.org](http://www.inmost.org). The page features a header with the text "INMOST" and "A toolkit for distributed mathematical modeling". Below the header, there are two download buttons labeled "tar.gz" and ".zip". A blue button labeled "View on GitHub" is also visible. The main content area contains the following text:

**Welcome to INMOST project page.**

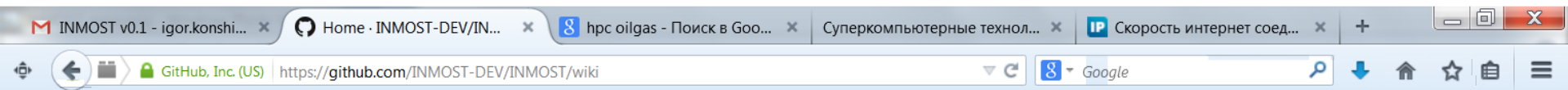
You are advised to have the following directory structure of INMOST resources for further instructions to work:

```
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



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

Find a Page...

[0100 Compilation](#)

[0200 Compilation Windows](#)

[0201 Obtain MSVC](#)

[0202 Obtain MSMPI](#)

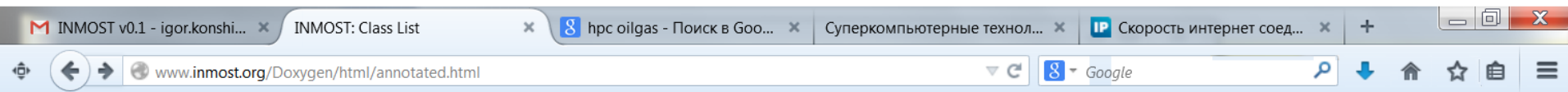
[0203 Compilation INMOST Windows](#)

[0204 Compilation ParMETIS Windows](#)

[0205 Compilation Zoltan Windows](#)

[0206 Compilation PFTSc](#)

# INMOST: doxygen.inmost.org



## INMOST

A toolkit for distributed mathematical modeling

Main Page   Related Pages   **Classes**   Files  

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]

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

# Программная платформа

Модули, входящие в состав платформы:

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

# Модуль сеточных операций

Базовый функционал:

- ❑ создание и модификация неструктурированных сеток;
- ❑ полное представление сетки: вершины, ребра, грани, ячейки; множества элементов;
- ❑ гибкая поддержка задания данных фиксированной или произвольной длины на всех элементах сетки или на некоторых подмножествах элементов.



# Модуль сеточных операций

Функционал для параллельных вычислений:

- ❑ миграция элементов сетки между процессорами;
- ❑ обеспечение заданного числа слоев фиктивных ячеек через вершину, ребро или грань;
- ❑ обеспечение фиктивных ячеек, помеченных пользователем;
- ❑ обмен данными и редукция данных.

# Модуль сеточных операций

## □ Миграция элементов

- Позволяет сбалансировать сетку для равномерной загрузки задачи на всех процессорах,
- Использует модуль балансировки сетки,
- **Модуль балансировки сетки основан на пакетах Zoltan, Parmetis.**

# Модуль сеточных операций

- ❑ Фиктивные слои:
  - Произвольное число фиктивных слоев, независимо от разбиения,
  - Пользователь самостоятельно может задать, какие ячейки следует сделать фиктивными,
  - Синхронизация данных (обмен).
- ❑ Редукция данных позволяет совершить произвольную операцию над данными в общих и соответствующих фиктивных ячейках

# 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,
- Может вызывать линейные решатели из внешних пакетов PETSc и Trilinos.

# INMOST: дальнейшее развитие

- инструментарий для внедрения методов параллельного решения слау,
- инструментарий для дискретизации уравнений математической физики с помощью готовых модулей системы (автоматическое дифференцирование),
- Дополнительные сеточные примитивы для измельчения и разгрубления сеток,
- собственные методы балансировки сетки.

# Заключение: INMOST поддерживается и развивается

- Программная платформа INMOST развивается как инструмент для упрощения параллелизации приложений: ее применение позволяет легко перейти к параллельной реализации программы,
- В рамках платформы реализована нелинейная схема дискретизации, которая:
  - в случае анизотропных тензоров и неортогональных сеток позволяет получать более точное и физичное решение,
  - сравнима с линейной схемой по вычислительной сложности.
- В будущем планируется включение собственных модулей балансировки сетки и решения СЛАУ.

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

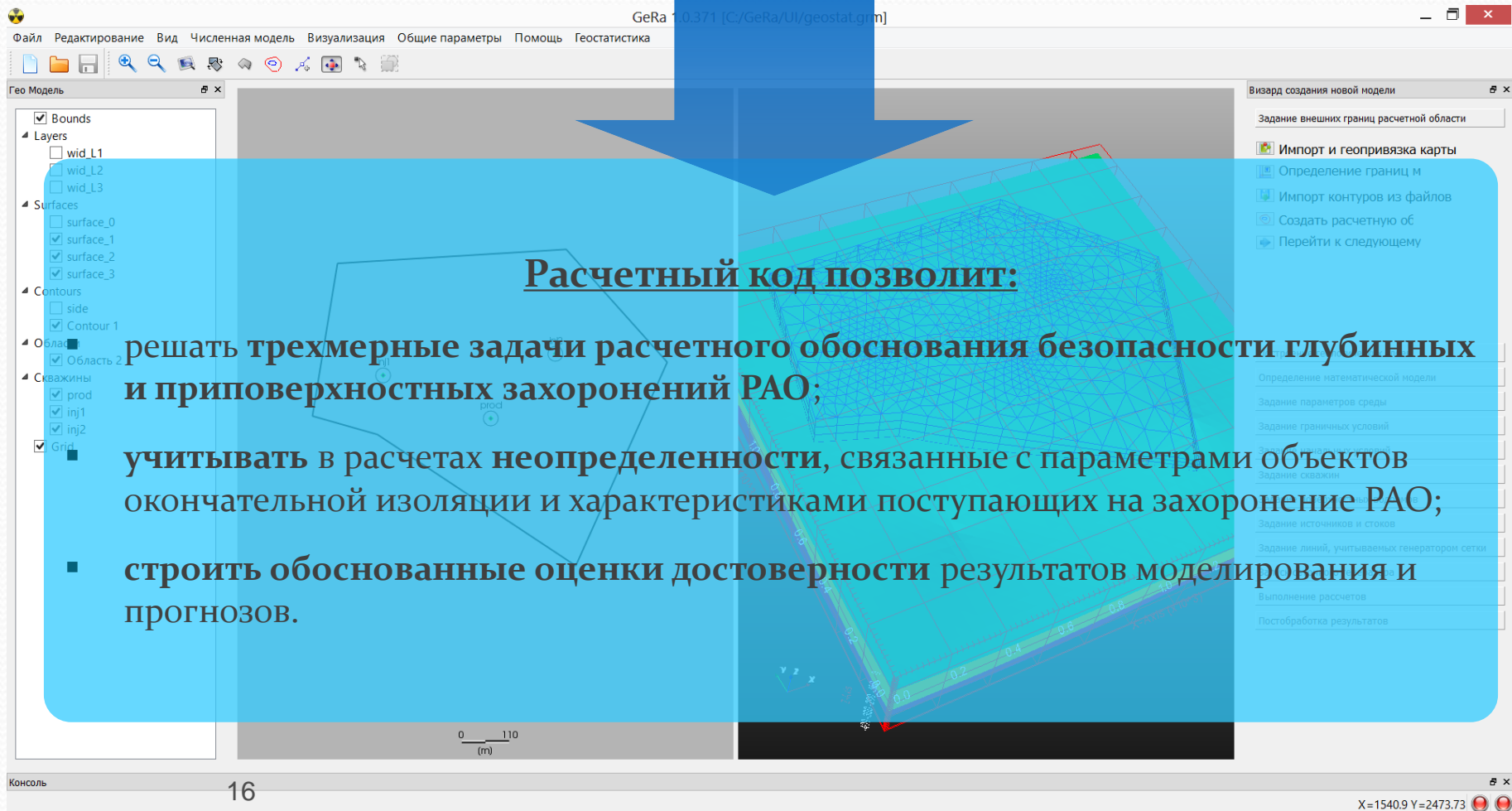


Суперкомпьютерный  
консорциум  
университетов России



# Расчетный код GeRa

Цель - создание интегрального расчетного кода нового поколения для обоснования безопасности захоронения РАО.



**Расчетный код позволит:**

- решать трехмерные задачи расчетного обоснования безопасности глубинных и приповерхностных захоронений РАО;
- учитывать в расчетах неопределенности, связанные с параметрами объектов окончательной изоляции и характеристиками поступающих на захоронение РАО;
- строить обоснованные оценки достоверности результатов моделирования и прогнозов.

GeRa 1.0.371 [C:/GeRa/UI/geoestat.gm]

Файл Редактирование Вид Численная модель Визуализация Общие параметры Помощь Геоestatистика

Гео Модель

- Bounds
- Layers
  - wid\_L1
  - wid\_L2
  - wid\_L3
- Surfaces
  - surface\_0
  - surface\_1
  - surface\_2
  - surface\_3
- Contours
  - side
  - Contour 1
- Область
- Скважины
  - prod
  - inj1
  - inj2
  - inj4
- Grid

Визард создания новой модели

- Задание внешних границ расчетной области
- Импорт и геопривязка карты
  - Определение границ м
  - Импорт контуров из файлов
  - Создать расчетную об
  - Перейти к следующему
- Определение математической модели
- Задание параметров среды
- Задание граничных условий
- Задание скважин
- Задание источников и стоков
- Задание линий, учитываемых генератором сети
- Выполнение расчетов
- Постобработка результатов

0 110 (m)

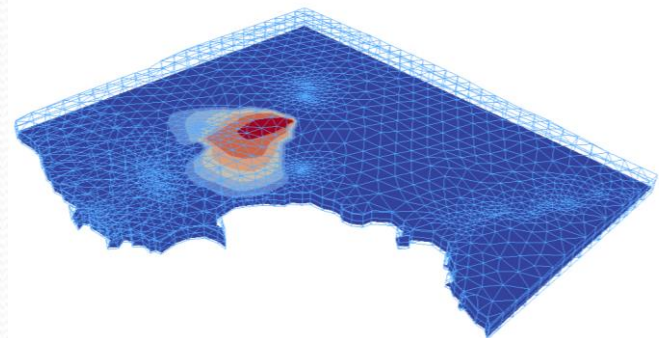
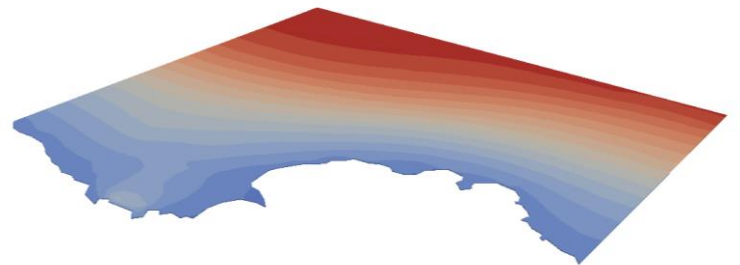
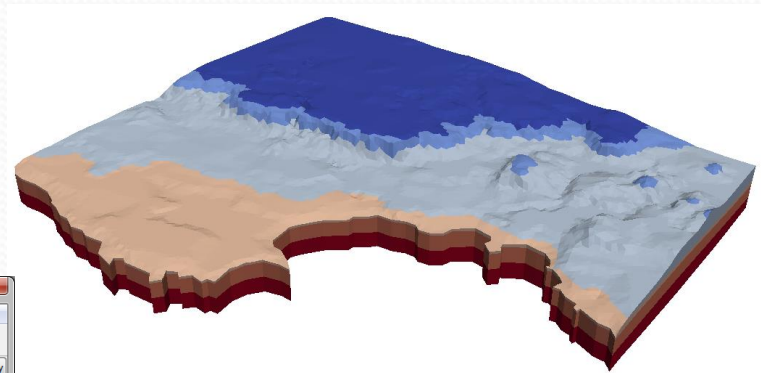
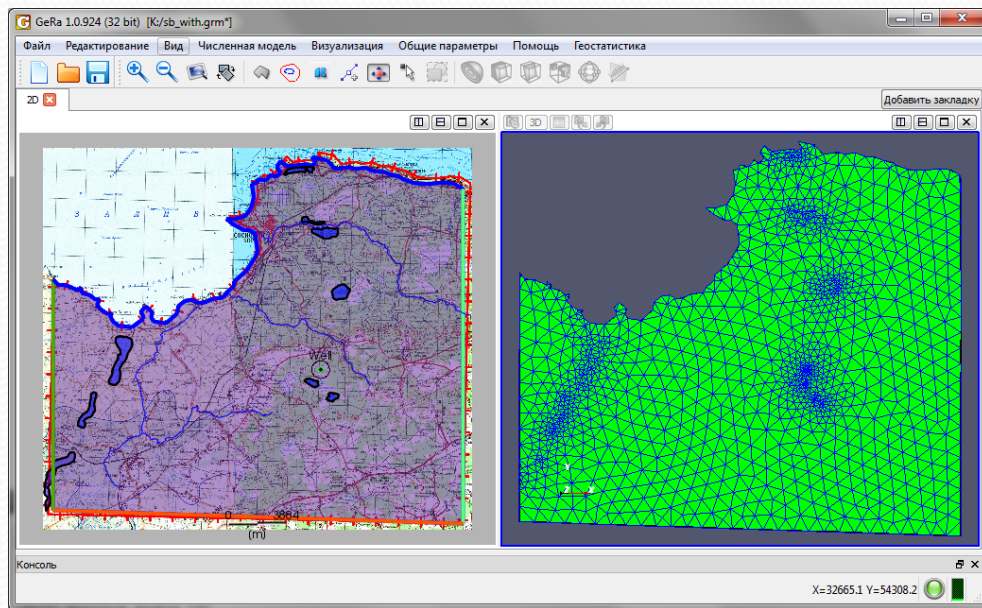
X=1540.9 Y=2473.73



# Модульная структура кода

1. Модуль построения геологической модели на основе исходных данных.
2. Модуль построения расчетных сеток.
3. Модуль дискретизации математических моделей.
4. Модуль расчета геохимических взаимодействий в системе вода-порода.
5. Параллельная программная MPI-платформа для работы с сетками и данными на сетках.
6. Модуль решения больших линейных систем.
7. Модуль программных средств хранения и обработки исходных данных, данных мониторинга, результатов расчетов и постпроцессинга по моделям.
8. Модуль калибровки моделей и оценки достоверности результатов.
9. Модуль расчета дозовых нагрузок для населения.
10. Графический интерфейс расчетного комплекса, интегрирующий все остальные модули и обеспечивающий средства визуализации.

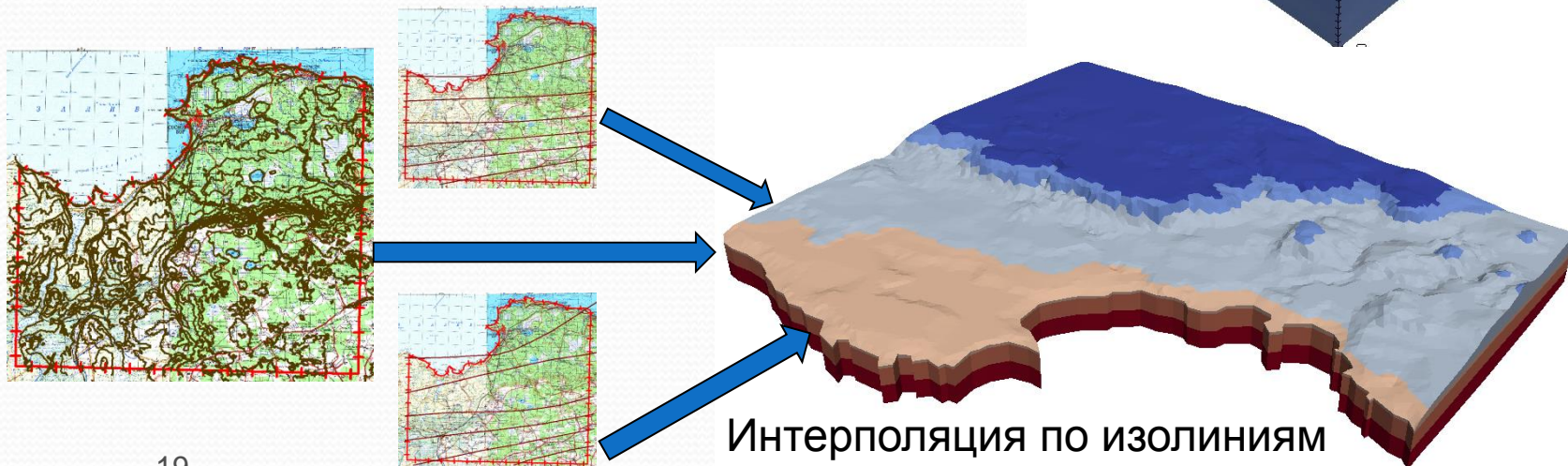
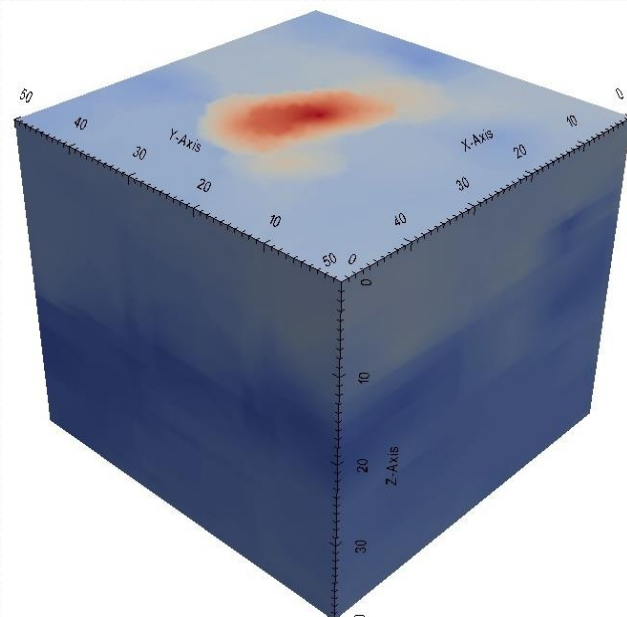
# Работа с GeRa сегодня



# Геологическое моделирование

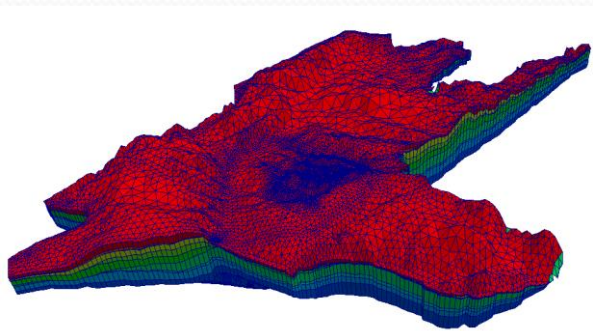
- Геостатистические методы
- Методы интерполяции данных
- Интерполяция по изолиниям и их импорт.
- Двумерный и трехмерный вариограммный анализ данных.
- Импорт готовых 2D и 3D полей параметров.

3D неоднородность

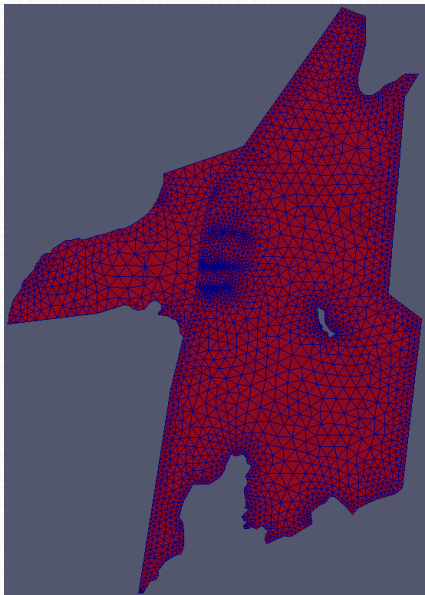
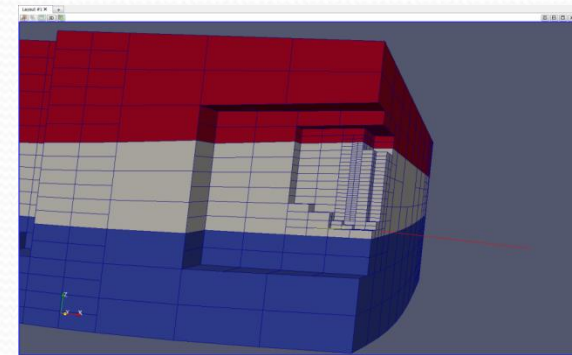
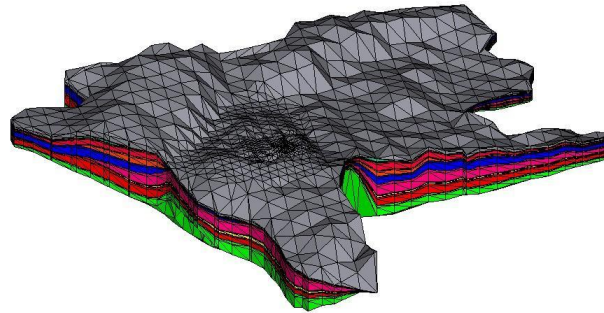


# Генераторы расчетных сеток

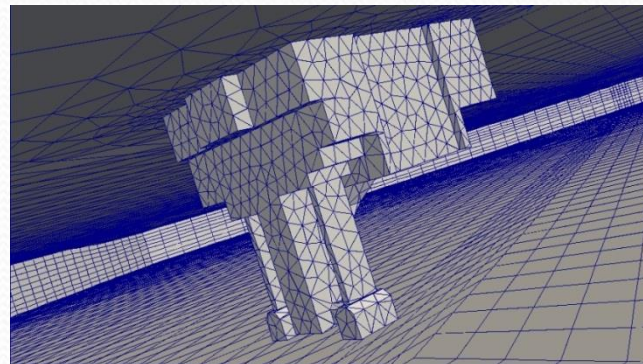
Треугольные призмы



Сколотые гексаэдры



- Автоматическое создание конформных сеток, отражающих геологическую структуру
- Адаптация сеток к локальным особенностям
- Перспектива - возможности загрузки объектов, заданных в САПР, динамические сетки



# Используемые численные

## методы

**Запуск расчетов**

**Дискретизация задачи фильтрации**

- 0-схема
- Двухточечная схема
- Нелинейная схема

**Дискретизация задачи переноса**

- Схема расщепления по физическим процессам
  - Адвекция**
    - Схема 1 порядка
    - Схема 2 порядка
  - Диффузия**
    - Двухточечная схема
    - 0-схема
- Неявная схема линейного МКО
- Неявная схема нелинейного МКО

**Числовые параметры модели**

Дата начала моделирования: 01.01.1967

Шаг моделирования: 0,0500

Дата окончания моделирования: 30.01.1967

Сохранение каждый: 1 шаг

Каталог результатов: C:\temp\results

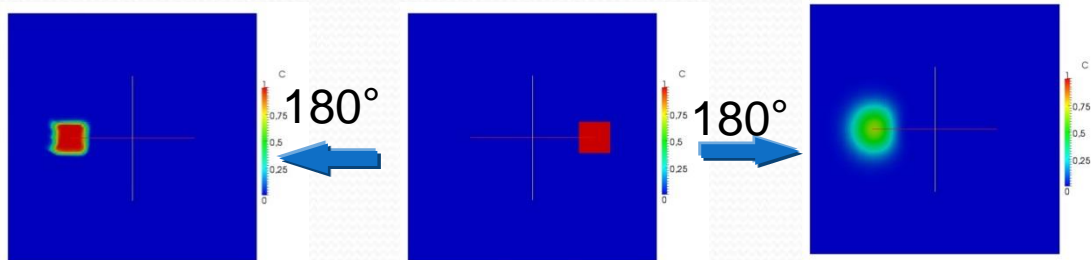
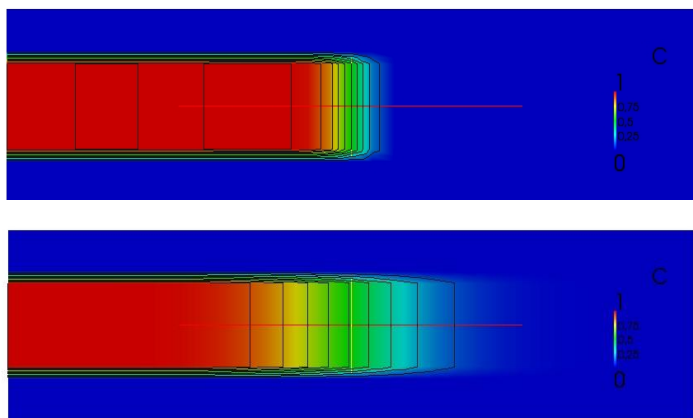
OK Save Cancel

### Основные требования:

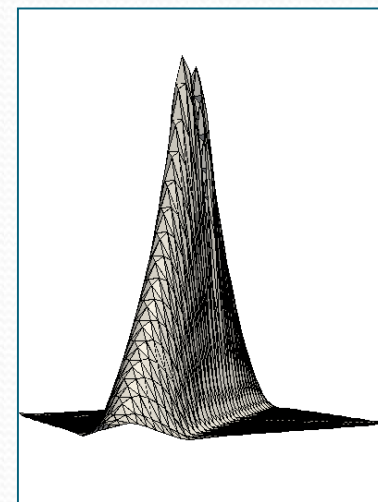
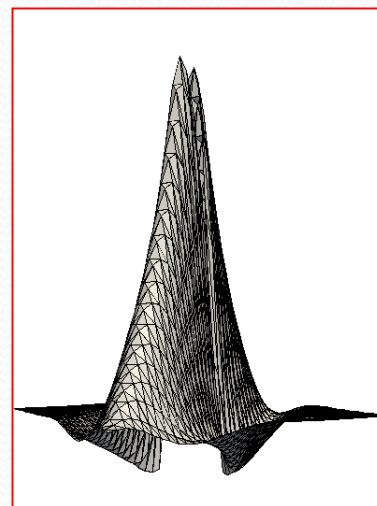
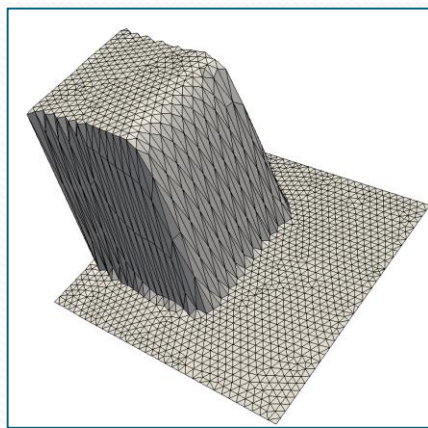
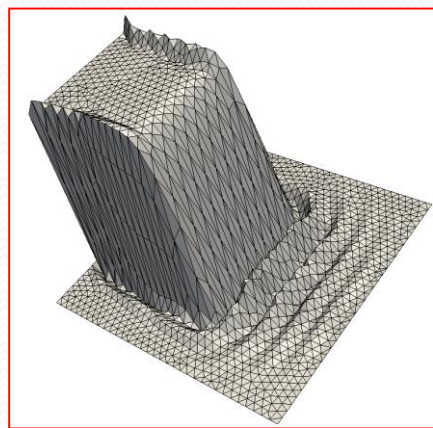
- Сохранение массы
- Высокий порядок точности
- Работа на произвольных многогранных сетках, с произвольными параметрами
- Монотонность
- Высокое качество переноса фронта (низкая численная диффузия)

# Модуль дискретизации: эффективные численные методы

- Низкая численная диффузия в задачах переноса

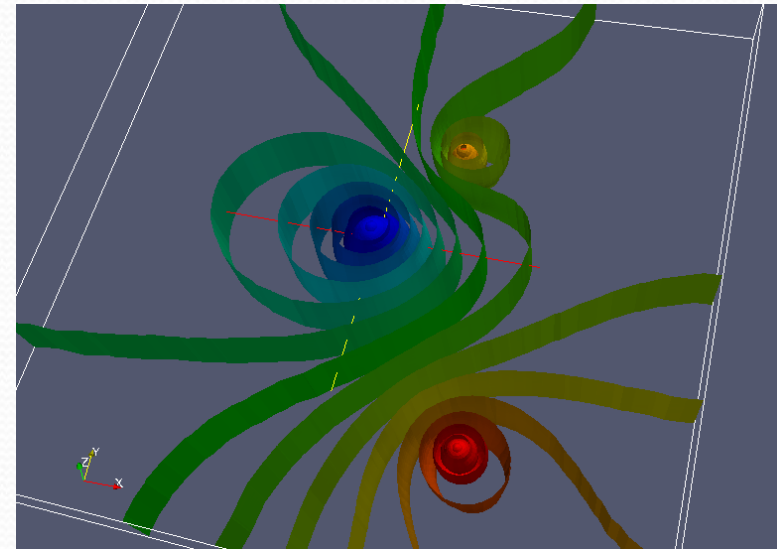
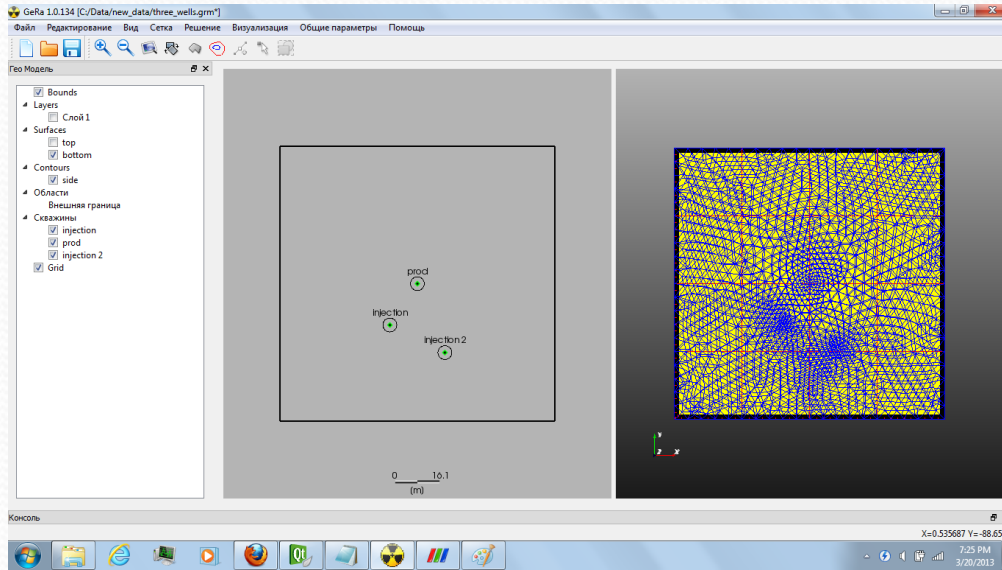


- Монотонность – важно для химических расчетов

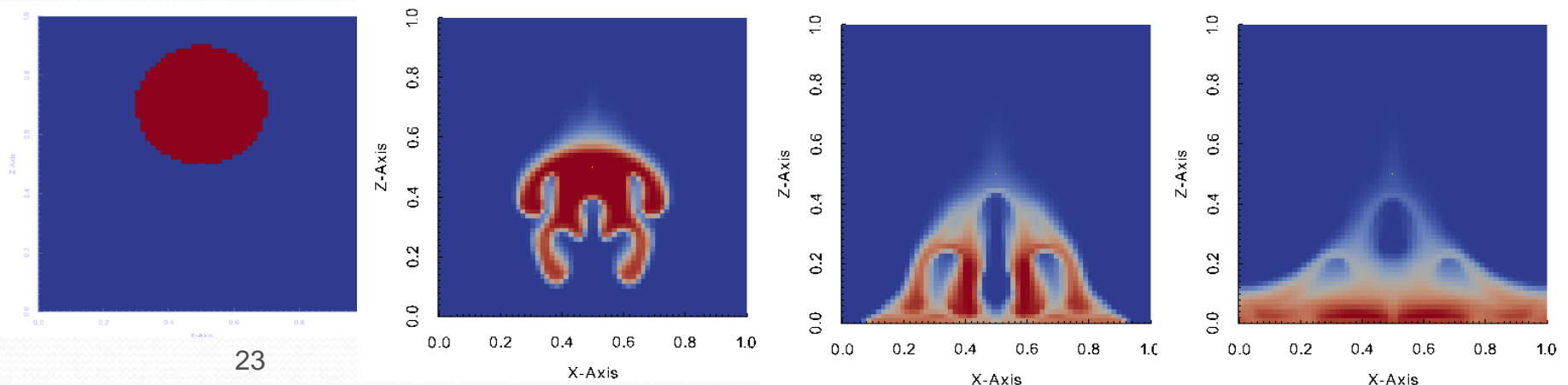


# Моделирование фильтрации

## Насыщенная фильтрация при работе трех скважин

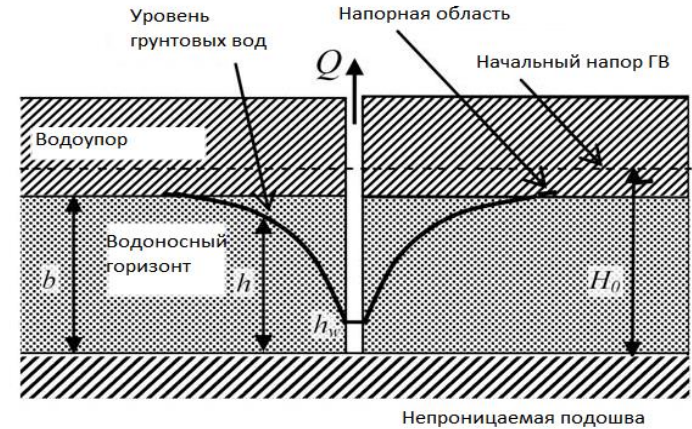
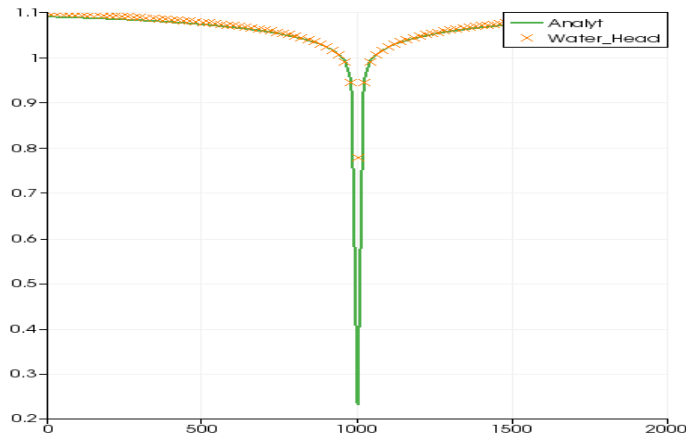


## Плотностная конвекция

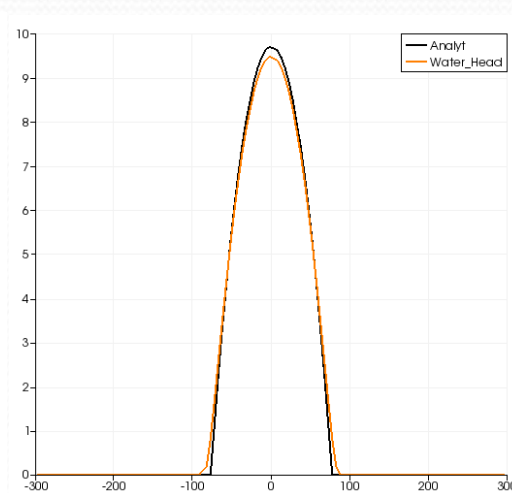
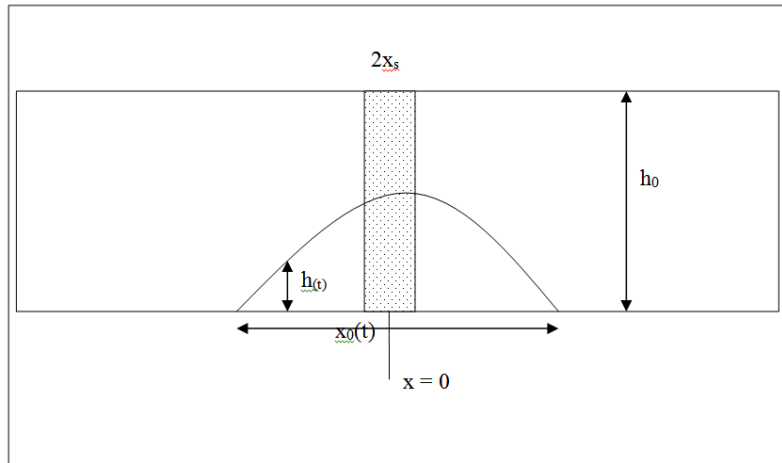


# Напорно-безнапорная фильтрация

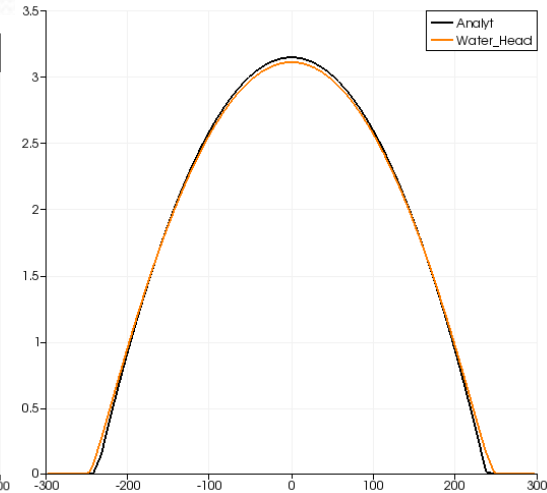
## Задача Тейса, напорно-безнапорный случай



## Растекание бугра подземных вод (Баренблатт)



$T=100$  сут



$T=3000$  сут

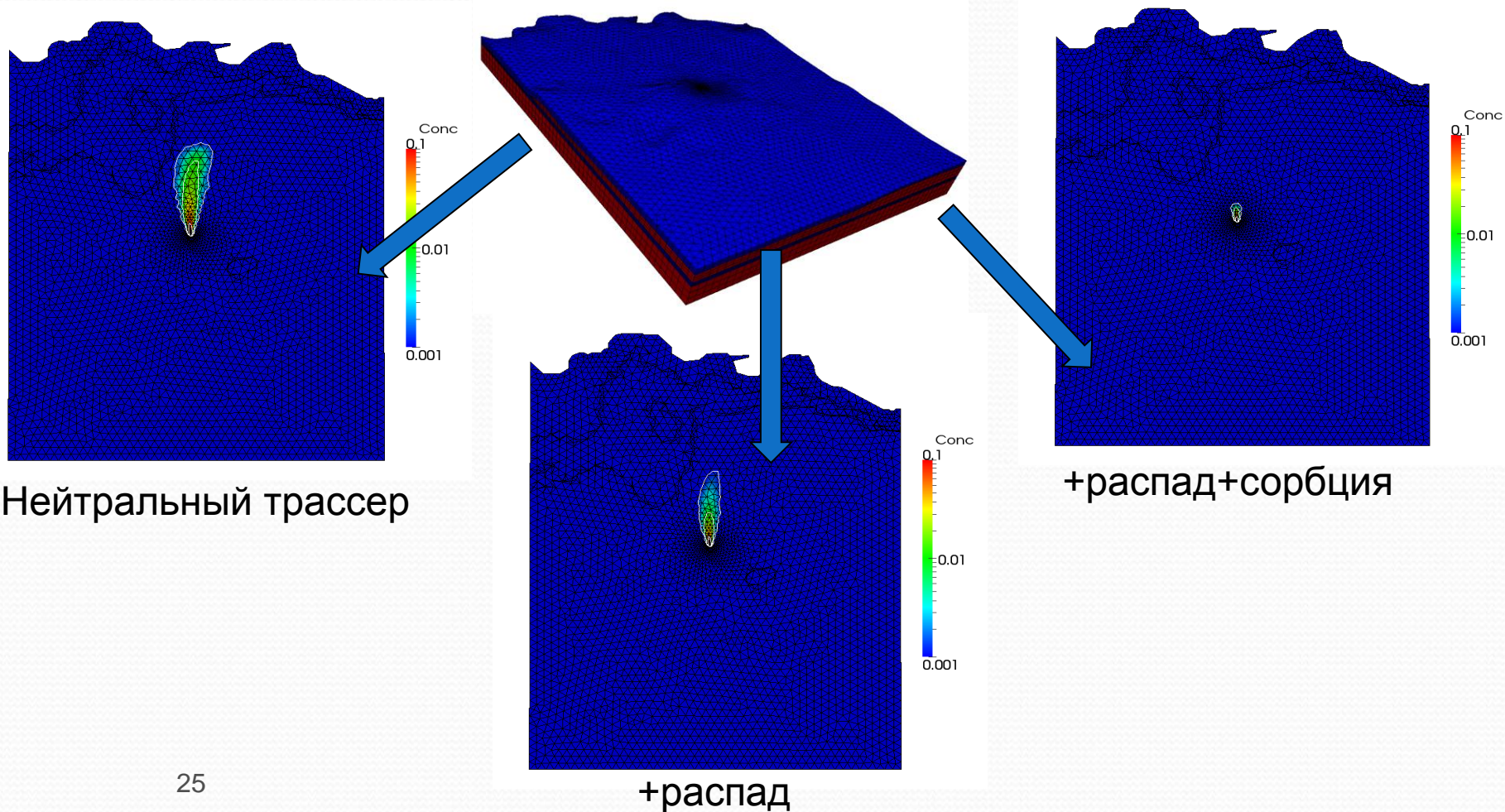


# Возможности моделирования

## переноса

Учет процессов сорбции и распада при миграции радионуклидов

Модель с реальной геологией (4 слоя)



# Параллелизация кода

Параллельный режим позволяет:

- Уменьшить **время** расчетов.
- Увеличить используемую **память** для хранения данных, что позволит использовать более подробные расчетные сетки и повысить точность расчетов.
- Использовать **удаленные** вычислительные системы для проведения расчетов.

# Взаимодействие с пользователем при удаленном запуске параллельных расчетов

Задание 1: No\_UI\_discretization [2 процессов]

```
[0]it 32: res = 0.00170203 (2.05538e-006)
[1]Discretization finished successfully!
[1]Well prod rate = 10
[0]Discretization finished successfully!
[0]Well prod rate = 10
[0]Boundary fluxes: inflow = 0 outflow = 10
[0]Rainfall recharge = 0
[0]Wells: inflow = 10 outflow = 0
[0]Lakes: inflow = 0 outflow = 0
[0]Rivers: inflow = 0 outflow = 0
[0]nfields = 0
[0]-----
[0]Stage      Calls  Time(cumul)  %%  Time(self)  %%
[0]-----
[0]Stage_UD_total      1  4.094815  100.00  0.022302  0.54
[0]Stage_Discretization  1  3.942449  96.28  3.940964  96.24
[0]Stage_UD_init       1  0.130064   3.18  0.002608  0.06
[0]Stage_UD_wells      2  0.128941   3.15  0.128941  3.15
[0]-----
Задание 1 завершено с кодом 0 и статусом 0 выходных файлов 3
```

UI

Завершилось задание 1  
Выходные файлы:  
C:/blender/01pro/GeRa662/UI/Head.pvtk  
C:/blender/01pro/GeRa662/UI/Head\_0.vtk  
C:/blender/01pro/GeRa662/UI/Head\_1.vtk

OK

Соединение с кластером

Имя кластера или IP: 194.106.194.42

Порт MPI агента: 13013

Использовать SSH туннель

Логин: cluster\_user

Пароль: \*\*\*\*\*

SSH порт: 9922

Файл с приватным ключем: c:/data/cluster.ppk

Открыть

OK Cancel

X=0.866973 Y=-0.880734

Задание 1: cri.exe [1 процессоров]

- Запустить модуль
- Остановить задание
- Показать состояние процесса

# Решение модельной задачи фильтрации на многоядерных ЭВМ

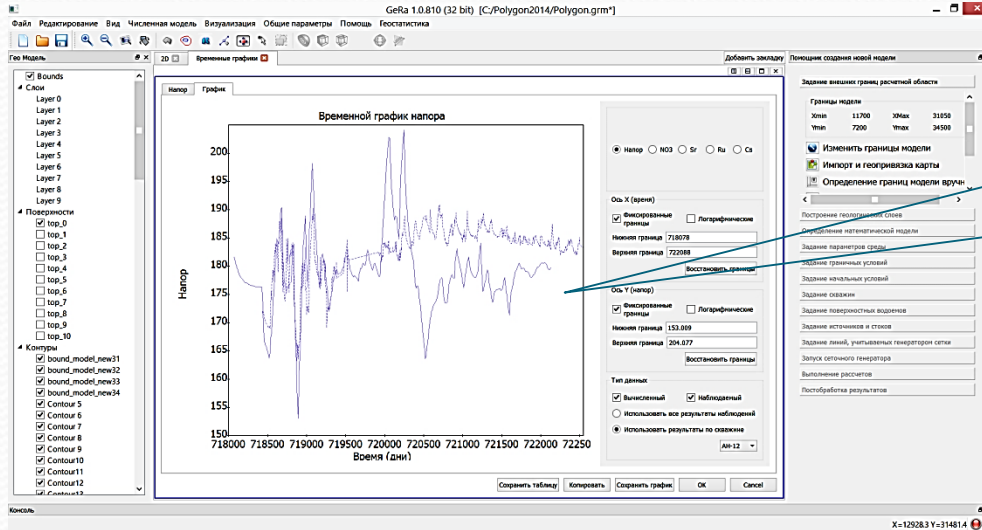
Результаты расчетов на многоядерном ПК

Проц.	T(discr)	Ускорение	T(total)	Ускорение
1	23,60	1	35,79	1
2	11,44	2,06	18,76	1,91
4	7,73	<b>3,05</b>	12,84	2,79

Результаты расчетов на кластере ИВМ РАН

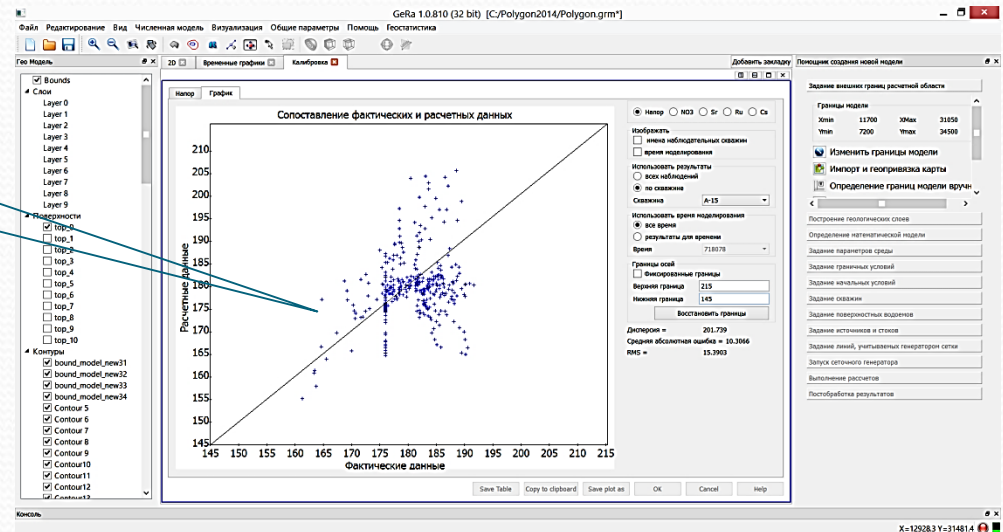
Проц.	T(discr)	Ускорение	Эфф-ть
1	41,42	1	1
2	19,58	2,11	1,05
4	12,80	3,23	0,80
8	6,04	6,05	0,75
16	3,61	11,47	0,71
32	1,33	<b>31,14</b>	<b>0,97</b>

# Возможности оценки результатов



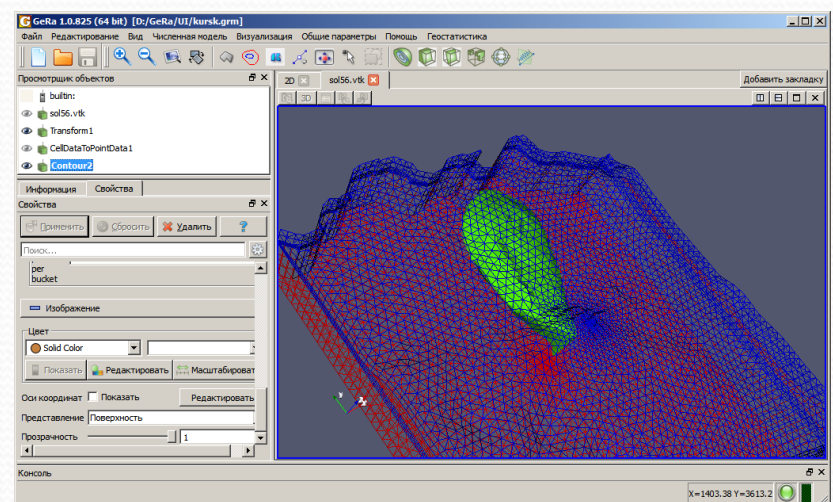
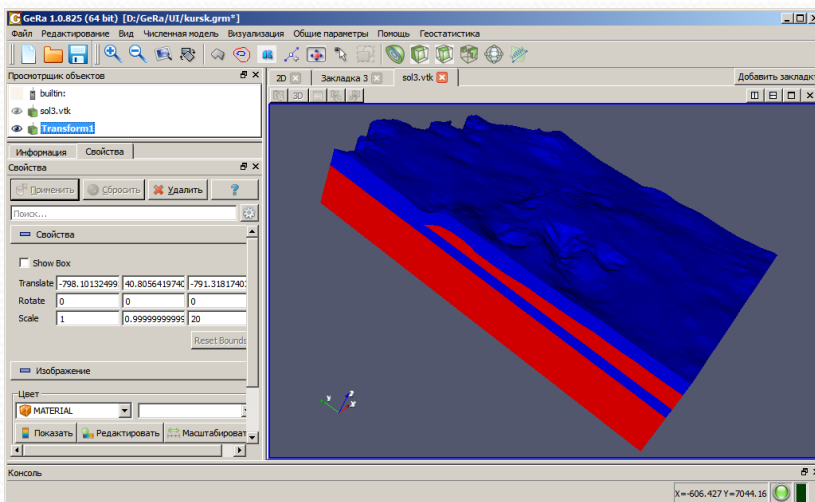
Сопоставление расчетных и наблюдаемых величин (связь с базой данных наблюдений)

Диаграмма рассеяния



# Возможности визуализации

- построение сечений;
- построение графиков вдоль линии;
- построение поверхностей и линий уровня;
- отрисовка векторов;
- отображение подмножества ячеек, удовлетворяющих заданному шаблону.
- масштабирование по осям и т.д.



# Ключевые достоинства комплекса GeRa

- Широкий спектр моделируемых процессов;
- Использование современных численных методов (сетки, дискретизации);
- Параллельность, вычислительная эффективность;
- Интегральный подход: полная цепочка моделирования вплоть до доз;
- Привязка к российским объектам (процессы, параметры и т.д.);
- Высокоразвитый графический интерфейс;
- Отчуждаемость.

Референтные проекты:

ASCEM, Минэнерго США (LANL, SRNL, LBNL, PNNL, ORNL + ...+ИБРАЭ РАН)  
MODFLOW-USG (USGS+Shlumberger), FEFLOW (WASY GmbH)