

Параллельные процессы на этапах петафлопного моделирования

В.П. Ильин

Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН,
Новосибирский государственный
университет,
Новосибирск, ilin@sccc.ru

ПАВТ- 2011, Москва

Содержание:

1. Введение. Новации параллельных супервычислений
 - От пета- к экзафлопным дата – центрам
 - “Дорожная карта” IESP
 - Облачные вычисления, SAS и другие парадизмы
 - От “отображения алгоритмов “... к конвергенции
 - Новая вычислительная математика и сопутствующие проблемы
2. Параллельность на этапах жизненного цикла математического моделирования
3. Технологии и задачи параллельного программирования
4. Концепция и структура базовой системы моделирования (БСМ)

Постановка задач и алгоритмов

1. Междисциплинарные задачи (multiphysics), комплексное моделирование: упругость и прочность, гидро-газодинамика, многофазная теплофизика, электромагнетизм, химическая кинетика, биофизика.
2. Оптимизационные подходы решения обратных задач: идентификация параметров модели, проектирование и оптимизация оборудования и режимов технологических процессов.
3. Обеспечение адекватности модели и точности расчетов, в том числе при недоопределенности исходных данных, сверхбольшие порядки степеней свободы.
4. Новые математические подходы: уравнения на многообразиях, дифференциальные и дискретные формы, теория групп, Гамильтонов формализм, динамические системы.

Технологическая цепочка моделирования

I. Функциональное и геометрическое моделирование

1.1. Описание геометрии расчетной области (объекты, топологические связи и операции): вершины, ребра, грани, подобласти, составные типовые объекты, локальные и глобальные системы координат; аналитические представления, сплайны, кривые и поверхности Безье, канонические кривые и поверхности; макросеть, гиперграф матрицы инцидентности (смежности); сдвиги, повороты, пересечения кривых и поверхностей, масштабирование; теоретико-множественные операции; визуализация, контроль и редактирование задания; множественные структуры данных с внутренней конвертацией и выходом на внешние форматы в существующие ППП и CAD/CAM/CAE – системы.

1.2. Задание функциональных объектов (материальных свойств сред):

- в общем случае математическая постановка может включать системы дифференциальных и/или интегральных уравнений, а также эквивалентные вариационные формулировки;
- функциональные объекты – это виды решаемых уравнений, граничные и начальные условия, а также входящие в них коэффициенты, которые могут задаваться своими значениями, арифметическими выражениями или определяемыми пользователем функциями;
- в каждой подобласти могут решаться “свои” уравнения, а граничных сегментах – задаваться различные внешние или внутренние краевые условия (в случае систем с несколькими неизвестными функциями – для каждой из них); все функциональные данные определяются с привязкой к соответствующим геометрическим объектам;
- в случае с оптимизационных подходов к решению обратных задач любые из вышеназванных численных данных могут быть объявлены параметризуемыми для обеспечения многовариантных расчетов последовательности прямых задач; в данном случае дополнительно описываются минимизируемый целевой функционал, а также линейные и функциональные ограничения на варьируемые параметры;

1.3. Дополнительная информация:

схемы вычислительного процесса, содержание и форма выводимых результатов, указания по хранению данных и т.д.

1.4. Результатом выполнения данного этапа являются геометрическая и функциональная структура данных (ГСД и ФСД), полностью определяющих постановку задачи и (возможно) вычислительную схему ее решения.

1.5. Принципы распараллеливания:

в силу ограниченного объема участвующих на этом этапе данных (до нескольких сот геометрических и функциональных объектов) вся информация копируется по всем используемым процессорам и их обработка полностью распараллеливается без коммуникационных потерь.

II. Дискретизация расчетной области

Этот этап – построение сеточной расчетной области – является отправным и ключевым в реализации численных методов.

2.1. Типы сеток: адаптивные, структурированные (регулярные), неструктурированные (нерегулярные) и квазиструктурированные (квазирегулярные), динамические, разнесенные; согласованные и несогласованные, локальные сгущения и функции плотности.

2.2. Виды элементов: параллелепипеды, призмы, актаэдры, тетраэдры (в том числе криволинейные);

2.3. Сеточные объекты – геометрические элементы микроуровня: узлы, ребра, грани, конечные объемы, ячейки Дирихле-Воронового. Топологические связи: сеточный гиперграф, матрицы инцидентности (смежности).

2.4. Критерии качества и оптимальности сеток.

- 2.5. Методы построения сеток: квазиконформные отображения, вариационные принципы, методы дифференциальной геометрии, эмпирические и нейросетевые подходы.
- 2.6. Последовательность вложенных сеток, локальные сгущения и разложения.
- 2.7. Сеточная структура данных (ССД) – полная геометрическая и топологическая информация об объектах и их связях, с привязкой к ГСД и ФСД.
- 2.8. Сбалансированная декомпозиция сеточных подобластей на стадии их формирования. Параллельная реализация алгоритмов и распределение ССД по процессорам.

III. Аппроксимации уравнений

- 3.1. Методы конечных разностей, конечных объемов, конечных элементов (МКР, МКО, МКЭ), спектральные и коллокационные алгоритмы. Лагранжевые и смешанные подходы, метод больших частиц. Бессеточные алгоритмы.
- 3.2. По-элементные технологии: вычисление локальных матриц (без учета дальних связей) и сборка (ассемблирование) глобальных матриц.
- 3.3. Автоматизация построения алгоритмов для вычисления базисных функций, производных и интегралов.
- 3.4. Масштабируемое распараллеливание с отсутствием коммуникационных потерь.
- 3.5. Формирование алгебраической структуры данных (АСД) для больших систем линейных или нелинейных сеточных уравнений (СЛАУ, СНАУ) в общепринятых международных форматах (с порядками до сотен миллионов).

IV. Решение алгебраических задач (СЛАУ и проблема собственных значений)

- 4.1. Методы в подпространствах Крылова для вещественных и комплексных, эрмитовых и неэрмитовых, положительно определенных и знаконеопределенных матриц.
- 4.2. Алгоритмы предобуславливания матриц на основе приближенных подходов.
- 4.3. Методы декомпозиции областей с налеганием и без, с различными промежуточными условиями на смежных границах, с крыловскими ускорениями в подпространствах следов.
- 4.4. Алгебраические многосеточные методы с локальными и глобальными сгущениями на последовательности вложенных сеток.
- 4.5. Гибридное распараллеливание на этапах предобуславливания и итерирования на МВС с общей и распределенной памятью. Использование спецвычислителей типа GPU и ПЛИСС.

V. Постпроцессинг и визуализация результатов

- 5.1. Вычисление графиков, изолиний и изоповерхностей, сечений, характеристик векторных многомерных полей по расчетным сеточным данным.
- 5.2. Масштабируемое распараллеливание с активным использованием графических ускорителей.

VI. Управление вычислительным процессом

Решение нестационарных, нелинейных, междисциплинарных, многовариантных и оптимизационных задач.

VII. Анализ результатов и принятие решений по результатам моделирования

Концепция и структура базовой системы моделирования (БСМ)

- Открытость и расширяемость системы
- Независимость разработки и функционирования компонент
- Взаимодействие компонент через множественные структуры данных со взаимным конвертированием
- Инструментальная среда для конструирования приложений (ППП)
- Взаимодействие с внешними программными разработками (библиотеки, ППП, САД/САЕ – системы)
- Интеграция и координация коллективов разработчиков
- Адаптация к компьютерным архитектурам и платформам

Основные компоненты БСМ

- Система геометрического и функционального моделирования (СГФМ)
- Библиотека сеточных генераторов (Delaunay)
- Библиотека аппроксиматоров (МКО, МКЭ, ...)
- Библиотека алгебраических решателей (Krylov)
- Оптимизационные алгоритмы решения обратных задач
- Постпроцессинг и визуализация
- Структуры данных СГФД, ССД, АСД, ГрСД

Структура функциональных и информационных компонент БСМ

