

Sesión 6. Cálculo Paralelo en Elmer

M. Meis^{1,2} y F. Varas^{1,3}

¹Universidad de Vigo, ²Vicus Desarrollos Tecnológicos, S.A.,

³Universidad Politécnica de Madrid

Introducción a la Simulación Numérica Multifísica con
ELMER

28–29 de enero de 2015



Unión Europea
FEDER



Invertimos en su futuro



Proyecto CloudPYME

El proyecto CloudPYME (ID 0682_CLOUDPYME2_1_E) está cofinanciado por la Comisión Europea a través del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), dentro de la tercera convocatoria de proyectos del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal 2007-2013 (POCTEP).



Unión Europea
FEDER



Invertimos en su futuro

Plan

- 1 Cálculo paralelo en Elmer
 - Cuestiones generales
 - Paralelización en Elmer

Plan

- 1 Cálculo paralelo en Elmer
 - Cuestiones generales
 - Paralelización en Elmer

Plan

- 1 Cálculo paralelo en Elmer
 - Cuestiones generales
 - Paralelización en Elmer

Temas generales sobre cálculo paralelo

- El problema es dividido y ejecutado (como mínimo) en más de un procesador simultáneamente
- Los procesadores necesitan comunicarse durante la ejecución
 - Para este propósito una biblioteca pasando mensaje es usado
 - Elmer usa Interfaz de Paso Mensaje (MPI)
- El cálculo paralelo es beneficioso cuando una ejecución en serie toma demasiado tiempo
 - Resolución de sistemas lineales
 - En menor medida, proceso de ensamblado
- Ejecuciones en paralelo requieren ajustes y testeo → Pensar cuidadosamente si realmente necesitas hacer ejecuciones en paralelo

Resolvedores en paralelo

- Las ejecuciones en paralelo el sistema lineal de ecuaciones son resueltos
 - Métodos iterativos
 - Métodos directos (de tipo multifrontal)
- Los resolvedores no necesitan la matriz entera
- Los resolvedores iterativos necesitan
 - multiplicación matriz–vector
 - producto punto para los vectores
 - una norma para los vectores
- Se obtiene un archivo de resultados para cada partición

Plan

- 1 Cálculo paralelo en Elmer
 - Cuestiones generales
 - Paralelización en Elmer

Generalidades de la implementación

Características

- Elmer utiliza descomposición de dominios para la distribución de carga
- Biblioteca de comunicación: MPI
- Biblioteca de algoritmos para la partición de mallas
 - Metis
 - Scotch
 - Herramienta ElmerGrid
- Portabilidad
 - Sistemas operativos: Windows, Linux
 - Sistemas con memoria compartida (*multi-core*) y distribuida (*multi-processor*)

Generalidades de la implementación

Características

- Algoritmos para unificar los archivos de resultados
- La implementación no realiza balance de carga interna
- Todos los *solvers* de Elmer pueden ser usados en cálculos paralelos (en principio)
- En principio, las funciones definidas por el usuario funcionan en paralelo sin ninguna modificación especial

Estrategias numéricas

Métodos numéricos

- Métodos iterativos de tipo *Krylov*
- Bibliotecas especiales:
 - Hype (familia de algoritmos de resolvedores y preconditionadores)
 - MUMPS (resolvedor directo multifrontal)

Desafíos de las ejecuciones en paralelo

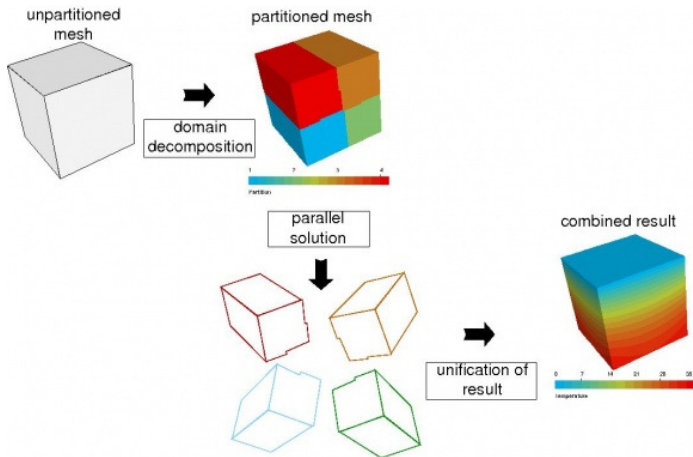
Desafíos numéricos

- El preconditionamiento es realizado localmente sobre cada partición, excepto para preconditionamiento multimalla
 - Reduce la efectividad del preconditionamiento
 - Especialmente problemático con ecuaciones difíciles (por ejemplo Navier–Stokes) o con un gran número de particiones
- Ejecuciones en paralelo sólo corren con elementos *normales*
 - p-elementos, elementos discontinuos de Galerkin no son soportados

Desafíos modelos

- Paralelización de todos los modelos

Concepto general de una ejecución en Elmer



Establecimiento de ejecuciones en paralelo

Requerimientos

Compilación en paralelo

Pasos

- Particionado de la malla
- Definición del archivo SIF
- Ejecución en paralelo (comando **mpirun**)
- Unificación de los archivos de resultados

Ejemplo

Partir la malla

```
ElmerGrid 14 2 filename -metis 4
```

Ejecutar la resolución en paralelo (ES necesario el archivo ELMERSOLVER_STARTINFO)

```
mpirun -np 4 ElmerSolver_mpi
```

Unificar archivos de resultados ElmerGrid

```
ElmerGrid 15 3 filename.ep
```