

Sesión 7. Cálculo Paralelo en Elmer

M. Meis y F. Varas

Departamento de Matemática Aplicada II
Universidad de Vigo

Introducción a Elmer, software libre
de simulación numérica multifísica
A Coruña, 27 de Junio al 1 de Julio de 2011

Plan

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

- 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

- El 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

- 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
 - 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:
 - Hypre (familia de algoritmos de resolvedores y preconditionadores)
 - MUMPS (resolvedor directo multifrontal)

Desafíos de las ejecuciones en paralelo

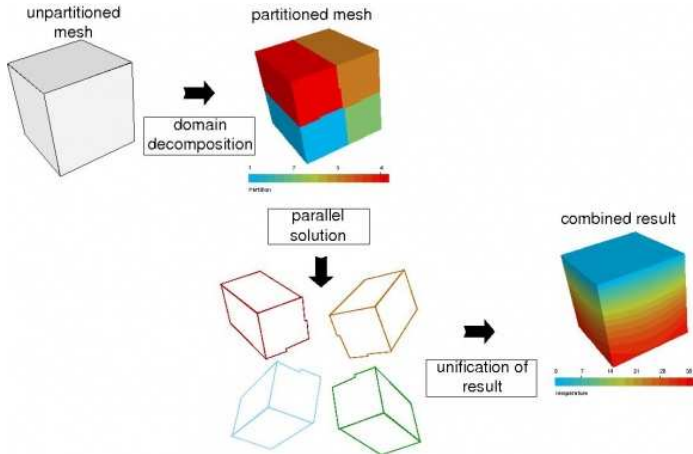
Desafíos numéricos

- 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 resultadosElmerGrid

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