

УДК 519.688

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛН В СЛОЖНО ПОСТРОЕННЫХ СРЕДАХ НА ГИБРИДНОМ КЛАСТЕРЕ*

© 2014 г.

Сапетина А.Ф.

*Институт вычислительной математики и математической геофизики
СО РАН, Новосибирский государственный университет,
Новосибирск, Российская Федерация*

afsapetina@gmail.com

Поступила в редакцию 10.10.2014

Рассматривается численное моделирование распространения упругих волн в трехмерных неоднородных средах на основе решения полной системы уравнений теории упругости с применением конечно-разностного метода и вспомогательного алгоритма CFS-PML для поглощения отражений упругих волн от границы расчетной области. Предлагаются способы распараллеливания и оптимизации программы для численных расчетов на гибридном кластере, оснащенном графическими картами общего назначения, с помощью технологий CUDA и MPI.

Ключевые слова: 3D численное моделирование, упругие волны, графический процессор (GPU), гибридный кластер, CUDA.

Введение

Одним из путей изучения строения геологических объектов является активный вибросейсмический мониторинг. Проведение натурных геофизических экспериментов позволяет получить некоторые представления о скоростных параметрах упругой среды, а также о геометрии изучаемого объекта. Но в процессе обработки результатов полевого эксперимента могут возникнуть интересные эффекты, требующие дальнейшего исследования. Создание математических моделей изучаемых объектов и дальнейшее моделирование сейсмических полей помогают в изучении реальных объектов.

В связи с тем, что реальная область исследования зачастую имеет довольно сложный рельеф и не всегда удается поставить площадную систему наблюдения для решения обратной задачи геофизики, приходится решать набор прямых задач с целью определения параметров изучаемой среды, соответствующих экспериментальным наблюдениям, например на поверхности изучаемых грязевых вулканов. Такой подход широко применяется для решения обратных задач в геофизике, однако он требует решения большого количества прямых задач и, соответственно, большого времени вычислений.

* Выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант 13-07-00589).

Программный комплекс, решающий поставленную задачу на основе выбранного математического аппарата, должен иметь возможность моделирования упругой неоднородной среды со специфической геометрией. В связи со сложностью и масштабом моделируемой области решение задачи численного моделирования распространения упругих волн от сосредоточенного источника требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому необходима разработка параллельных программ для уменьшения времени расчета с возможностью моделирования «больших» 3D-моделей упругих сред.

Д.А. Караваевым были разработаны и обоснованы методы 3D численного моделирования сейсмических полей для сложных сред, характерных для грязевых вулканов. Им же разработан инструментарий для решения прикладных задач численного моделирования сейсмических полей, включающий построитель 3D-моделей неоднородных упругих сред и параллельную программу для численного моделирования распространения упругих волн, реализованную на кластерах с МРР-архитектурой, с использованием технологий MPI и OpenMP [1, 2].

Стоит отметить консервативность в развитии алгоритмов по сравнению с быстрым развитием современных вычислительных систем. С началом активного применения графических карт для вычислений общего назначения возникает проблема модификации алгоритмов под новую архитектуру.

В начале 2012 года в Сибирском суперкомпьютерном центре при Институте вычислительной математики и математической геофизики (ИВМиМГ) СО РАН запущен гибридный кластер с графическими процессорами NVidia Tesla M2090. Подобный вычислительный комплекс функционирует на базе Информационно-вычислительного центра Новосибирского государственного университета.

В ходе работы была проведена адаптация алгоритмов и создано программное обеспечение для решения задачи численного моделирования распространения упругих волн на гибридном кластере.

Постановка задачи

Численное моделирование распространения сейсмических волн в сложно построенных упругих неоднородных средах проводится на основе решения полной системы уравнений теории упругости с соответствующими начальными и граничными условиями, записанной для вектора скоростей смещений $\mathbf{u} = (U, V, W)^T$ и вектора компонент тензора напряжений $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz})^T$. В качестве области моделирования рассматривается изотропная трехмерная неоднородная сложно построенная упругая среда, представляющая собой параллелепипед, одна из граней которого является свободной поверхностью (плоскость $z = 0$).

Основные уравнения в векторной форме могут быть представлены в следующем виде:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = [A]\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{F}(t, x, y, z), \quad \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = [B]\mathbf{u},$$

$$A = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 & \partial/\partial y & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial x & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial y \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} (\lambda + 2\mu)\partial/\partial x & \lambda(\partial/\partial y) & \lambda(\partial/\partial z) \\ \lambda(\partial/\partial x) & (\lambda + 2\mu)\partial/\partial y & \lambda(\partial/\partial z) \\ \lambda(\partial/\partial x) & \lambda(\partial/\partial y) & (\lambda + 2\mu)\partial/\partial z \\ \mu(\partial/\partial y) & \mu(\partial/\partial x) & 0 \\ \mu(\partial/\partial z) & 0 & \mu(\partial/\partial x) \\ 0 & \mu(\partial/\partial z) & \mu(\partial/\partial y) \end{bmatrix},$$

где t – время, $\rho(x, y, z)$ – плотность, $\lambda(x, y, z)$, $\mu(x, y, z)$ – параметры Ламе, $\mathbf{F}(t, x, y, z) = F_x \mathbf{i} + F_y \mathbf{j} + F_z \mathbf{k}$; \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} – единичные направляющие векторы координатных осей.

Начальные условия имеют вид:

$$\sigma_{xz}|_{t=0} = 0, \quad \sigma_{yz}|_{t=0} = 0, \quad \sigma_{xy}|_{t=0} = 0,$$

$$\sigma_{xx}|_{t=0} = 0, \quad \sigma_{yy}|_{t=0} = 0, \quad \sigma_{zz}|_{t=0} = 0,$$

$$U(x, y, z)|_{t=0} = 0, \quad V(x, y, z)|_{t=0} = 0, \quad W(x, y, z)|_{t=0} = 0.$$

В качестве граничных условий на свободной поверхности выступают:

$$\sigma_{xz}|_{z=0} = 0, \quad \sigma_{yz}|_{z=0} = 0, \quad \sigma_{zz}|_{z=0} = 0.$$

Метод решения задачи

Метод решения поставленной задачи основан на использовании конечно-разностного метода. Алгоритм построения конечно-разностной схемы изложен в статье [3]. Расчет сеточных коэффициентов в разностной схеме проводится на основе интегральных законов сохранения, поскольку параметры λ , μ и ρ могут быть разрывными. Используемая конечно-разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству [3], рассматривается только равномерные сетки. Представим некоторые конечно-разностные уравнения используемой схемы:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i,j,k} + \rho_{i-1,j,k}}{2} \frac{u_{i-1/2,j,k}^{n+1} - u_{i-1/2,j,k}^n}{\tau} &= \frac{\sigma_{xxi,j,k}^{n+1/2} - \sigma_{xxi-1,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} + \\ &+ \frac{\sigma_{xyi-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - \sigma_{xyi-1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} + \frac{\sigma_{xzi-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - \sigma_{xzi-1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} + f_{xi,j,k}^n, \\ &\frac{\sigma_{xzi-1/2,j,k-1/2}^{n+1/2} - \sigma_{xzi-1/2,j,k-1/2}^{n-1/2}}{\tau} = \\ &= \mu l_{i-1/2,j,k-1/2} \left(\frac{u_{i-1/2,j,k}^n - u_{i-1/2,j,k-1}^n}{\Delta z} + \frac{w_{i,j,k-1/2}^n - w_{i-1,j,k-1/2}^n}{\Delta x} \right), \end{aligned}$$

где

$$\mu l_{i-1/2,j,k-1/2} = \left(\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\mu_{i,j,k}} + \frac{1}{\mu_{i-1,j,k}} + \frac{1}{\mu_{i,j,k-1}} + \frac{1}{\mu_{i-1,j,k-1}} \right) \right)^{-1}.$$

Критерий устойчивости данной схемы приведен в статье [3] и имеет следующий вид:

$$\tau \leq \left(Vp_{\max} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}} \right)^{-1},$$

где Vp_{\max} – максимальная скорость распространения упругих волн, а τ и Δx , Δy , Δz – шаги дискретизации по времени и пространству соответственно.

Вспомогательный метод поглощающих границ

В численном моделировании упругих волн возникают фиктивные отражения от границ моделируемой области из-за усечения реальной области моделирования. Для устранения этого эффекта в работе используется метод CFS-PML [4–6]. Он дает более правильную картину волнового поля для данной задачи в сравнении с классическим методом PML. Также его преимущества заключаются в более простой реализации, поскольку не происходит расщепления основных искомых компонент волнового поля на составляющие, в отличие от PML. Предлагаемый подход более экономичен с вычислительной точки зрения. Для больших 3D-задач при использовании CFS-PML может потребоваться размер памяти до 12% меньший по сравнению с классическим PML [6].

Поскольку область расчета представляет параллелепипед, а свободная поверхность располагается на верхней его грани, то каждая из его границ, за исключением свободной поверхности, окружается поглощающим слоем. Во внутренней области волновое поле рассчитывается по первоначальным конечно-разностным уравнениям, а при попадании волны в зону поглощения происходит расчет по новым формулам, описывающим подход к созданию поглощающих границ, при этом вводятся демпфирующие параметры d_l , α_l и k_l ($l = x, y, z$).

Приведем несколько основных уравнений для поглощающих слоев:

$$\begin{aligned} & \frac{\rho_{i,j,k} + \rho_{i-1,j,k}}{2} \frac{u_{i-1/2,j,k}^{n+1} - u_{i-1/2,j,k}^n}{\tau} = \frac{1}{k_x} \frac{\sigma_{xxi,j,k}^{n+1/2} - \sigma_{xxi-1,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} + \\ & + \frac{1}{k_y} \frac{\sigma_{xyi-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - \sigma_{xyi-1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} + \frac{1}{k_z} \frac{\sigma_{xzi-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - \sigma_{xzi-1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} + \\ & + \Psi_{xxi-1/2,j,k}^{n+1/2} + \Psi_{yxi-1/2,j,k}^{n+1/2} + \Psi_{zxi-1/2,j,k}^{n+1/2}, \\ & \Psi_{xxi-1/2,j,k}^{n+1/2} = b_{xi-1/2,j,k} \Psi_{xxi-1/2,j,k}^{n-1/2} + c_{xi-1/2,j,k} \frac{\sigma_{xxi,j,k}^{n+1/2} - \sigma_{xxi-1,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x}, \\ & \Psi_{yxi-1/2,j,k}^{n+1/2} = b_{yi-1/2,j,k} \Psi_{yxi-1/2,j,k}^{n-1/2} + c_{yi-1/2,j,k} \frac{\sigma_{xyi-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - \sigma_{xyi-1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y}, \\ & \Psi_{zxi-1/2,j,k}^{n+1/2} = b_{zi-1/2,j,k} \Psi_{zxi-1/2,j,k}^{n-1/2} + c_{zi-1/2,j,k} \frac{\sigma_{xzi-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - \sigma_{xzi-1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z}, \\ & \frac{\sigma_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n+1/2} - \sigma_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n-1/2}}{\tau} = \mu_2_{i,j-1/2,k-1/2} \left(\frac{1}{k_z} \frac{v_{i,j-1/2,k}^n - v_{i,j-1/2,k-1}^n}{\Delta z} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{k_y} \frac{w_{i,j,k-1/2}^n - w_{i,j-1,k-1/2}^n}{\Delta y} + \Omega_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n,y} + \Omega_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n,z} \right), \end{aligned}$$

$$\mu_2_{i,j-1/2,k-1/2} = \left(\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\mu_{i,j,k}} + \frac{1}{\mu_{i,j-1,k}} + \frac{1}{\mu_{i,j,k-1}} + \frac{1}{\mu_{i,j-1,k-1}} \right) \right)^{-1},$$

$$\Omega_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n,y} = b_{yj,j-1/2,k-1/2} \Omega_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n-1,y} + c_{yj,j-1/2,k-1/2} \frac{w_{i,j,k-1/2}^n - w_{i,j-1,k-1/2}^n}{\Delta y},$$

$$\Omega_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n,z} = b_{zj,j-1/2,k-1/2} \Omega_{yzi,j-1/2,k-1/2}^{n-1,z} + c_{zj,j-1/2,k-1/2} \frac{v_{i,j-1/2,k}^n - v_{i,j-1/2,k-1}^n}{\Delta z},$$

где коэффициенты b_l и c_l ($l = x, y, z$) зависят от соответствующих демпфирующих параметров.

Выбор значений демпфирующих параметров для численных расчетов в соответствующих поглощающих слоях проводится на основе результатов работы [5].

Адаптация алгоритмов

Целью работы была адаптация и оптимизация выбранных методов под архитектуру гибридного кластера такого типа, как кластер НКС-30Т+GPU ССКЦ ИВМиМГ СО РАН (<http://www2.sccc.ru>). Он состоит из 40 вычислительных узлов HP SL390s G7, каждый узел содержит два 6-ядерных CPU Xeon X5670 и три карты NVIDIA Tesla M2090 на архитектуре Fermi, у каждой 1 GPU с 512 ядрами и 6 ГБ оперативной памяти. Суммарно НКС-30Т+GPU содержит 80 процессоров (480 ядер) CPU и 120 процессоров (61440 ядер) GPU. Пиковая производительность – 85 Тфлопс.

В ходе работы создана параллельная программа для численного моделирования распространения волн в трехмерных неоднородных упругих средах, реализующая указанный конечно-разностный метод и метод поглощающих слоев и рассчитанная на использование узлов гибридного кластера. Для моделирования упругих сред со сложной геометрией используется построитель 3D-моделей неоднородных упругих сред, разработанный Д.А. Караваевым [1, 2].

Для распараллеливания задачи используется декомпозиция области на слои вдоль направления одной из координатных осей (рис. 1). Каждый слой рассчитывается на отдельном узле, где, в свою очередь, он разбивается еще на два подслоя вдоль той же координатной оси по числу графических ускорителей на узле, поддерживающих прямое копирование данных между ними по PCI-Eшине, без использования памяти хоста.

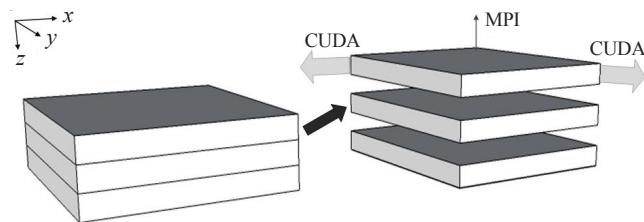


Рис. 1. Декомпозиция расчетной области для гибридного кластера

При такой реализации каждая графическая карта рассчитывает свою сеточную область внутри подслоя на каждом временном шаге независимо от других, за исключением точек, находящихся на границе между двумя соседними областями. Эти точки являются общими для каждой из областей, и для продолжения счета необходимо

димо производить обмен информацией об искомых величинах между «соседями». Обмены производятся при помощи технологии MPI. Работа с графическими ускорителями осуществляется с помощью технологии CUDA. Такой гибридный подход обеспечивает высокую степень параллелизма.

В ходе адаптации выбранных алгоритмов решена проблема выбора сетки блоков и сетки нитей в блоке для осуществления вычислений на GPU. С этим выбором естественно связаны модификации выбранных алгоритмов. Были рассмотрены два наиболее целесообразных (по степени параллелизма) варианта задания сеток и проведен анализ времени исполнения выбранных вариантов. На основе полученных выводов последующая работа велась для полностью трехмерной декомпозиции расчетной области на нити и блоки, размер которых по компоненте x , по возможности, должен быть равен или хотя бы кратен количеству физически одновременно исполняющихся нитей (warp).

Для реализации метода поглощающих границ для каждого поглощающего слоя добавлены свои трехмерные сетки нитей и блоков, соответствующие геометрии каждого поглощающего слоя. Это позволяет избежать увеличения времени счета, значительно сокращая количество ветвлений.

Также была осуществлена оптимизация выбранных алгоритмов, в том числе сокращено время обменов и доступа к памяти. Обмен данными зачастую является узким местом при параллелизации в численном моделировании. Использование явной конечно-разностной схемы на сдвинутых сетках и разбиение на слои и подслои позволяет обмениваться не всеми компонентами вектора скоростей смещений $\mathbf{u} = (U, V, W)^T$ и вектора компонент тензора напряжений $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz})^T$ между каждыми слоем и подслоем, что позволяет сократить количество обменов. Детальная схема обменов представлена на рис. 2.

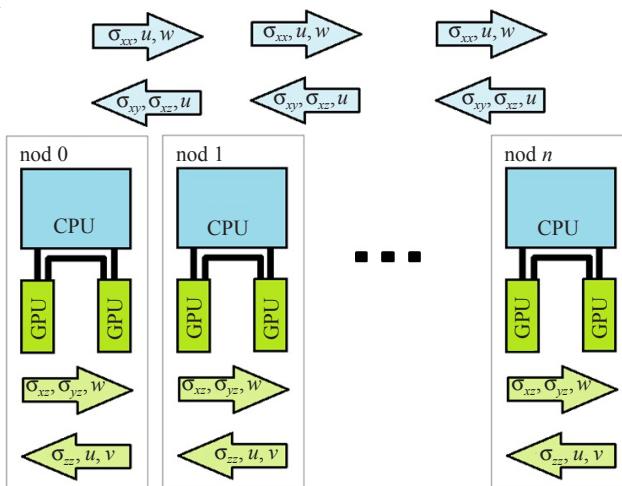


Рис. 2. Схема обменов данными между узлами и графическими ускорителями на каждом временном шаге

Для уменьшения времени обменов в данном подходе используются только графические карты, которые поддерживают прямое копирование данных между собой, что позволяет разгрузить шину данных, связывающую хост и графическую карту.

Для уменьшения времени доступа к памяти используется константная память графической карты. В ней хранятся самые часто используемые константы.

Анализ производительности и результаты тестового расчета

Для анализа производительности разработанного программного обеспечения исследована его сильная и слабая масштабируемость. Под сильной масштабируемостью будем понимать уменьшение времени счета одного шага одной и той же задачи при использовании большего числа графических ядер в рамках одной графической карты. Под слабой масштабируемостью будем понимать сохранение времени счета одного шага одного и того же объема задачи при одновременном увеличении количества графических карт.

Результаты исследования приведены на рис. 3 в виде графиков, откуда видно, что задача достаточно хорошо ложится на выбранную архитектуру. Получено ускорение около 40 раз в рамках одной графической карты, и достигнута эффективность около 90%.

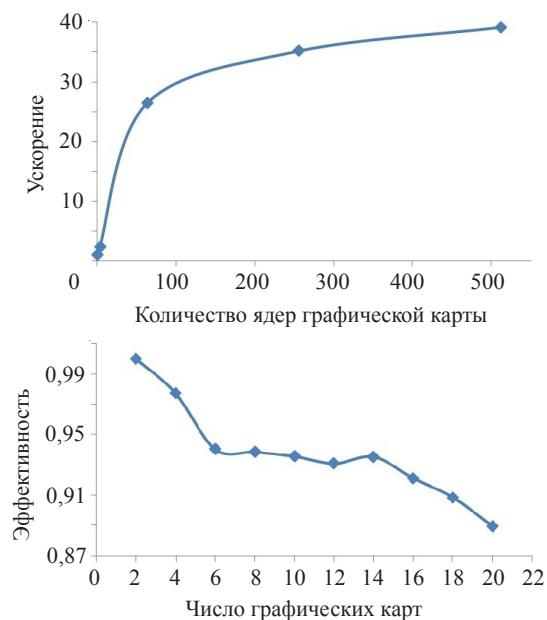


Рис. 3. Графики исследования сильной и слабой масштабируемости

Для иллюстрации работоспособности программы численного моделирования распространения сейсмических волн на рис. 4 приведены результаты расчетов для среды с тремя горизонтальными слоями.

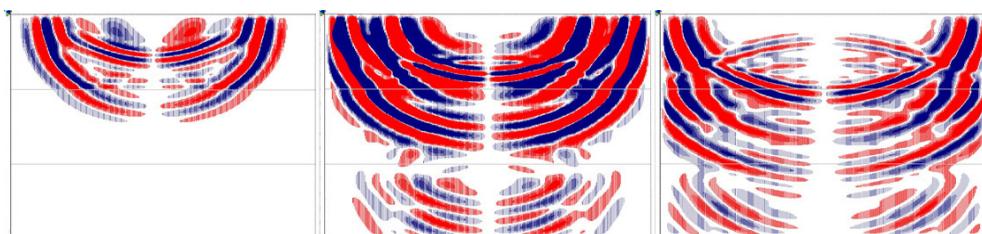


Рис. 4. Снимки компоненты V волнового поля, плоскость Oyz

Размеры среды 1,75 км, 1,75 км и 1 км вдоль осей Ox , Oy и Oz соответственно. Параметры: верхний слой – $V_p = 2,0$ км/с, $V_s = 1,0$ км/с, $\rho = 2,55$ г/см³, ширина

0,33 км; средний слой – $V_p = 2,7$ км/с, $V_s = 1,35$ км/с, $\rho = 2,75$ г/см³, ширина 0,33 км; нижний слой – $V_p = 2,5$ км/с, $V_s = 1,25$ км/с, $\rho = 2,55$ г/см³, ширина 0,34 км. Система возбуждения состоит из точечного источника частотой 25 Гц, располагающегося вблизи свободной поверхности в центре (координаты 0,875 км, 0,875 км, 0,05 км).

Заключение

Проведена адаптация выбранных методов решения задачи численного моделирования сейсмических полей под архитектуру гибридного кластера с графическими ускорителями. Успешно применен метод поглощающих границ CFS-PML и проведена его адаптация для использования на GPU.

Разработано высокопроизводительное программное обеспечение, численно решающее поставленную задачу на гибридном кластере, исследована его масштабируемость. Показано, что задача хорошо ложится на гибридную архитектуру. Это позволит ускорить процесс решения набора прямых задач распространения упругих волн с целью определения параметров изучаемой среды, соответствующих экспериментальным наблюдениям на поверхности грязевых вулканов.

Автор выражает благодарность научному руководителю Борису Михайловичу Глинскому.

Список литературы

1. Караваев Д.А. Параллельная реализация метода численного моделирования волновых полей в трехмерных моделях неоднородных сред // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2009. № 6 (1). С. 203–209.
2. Глинский Б.М., Караваев Д.А., Ковалевский В.В., Мартынов В.Н. Численное моделирование и экспериментальные исследования грязевого вулкана «Гора Карабетова» виброСейсмическими методами // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11. С. 95–104.
3. Bihl M., Weiland T. A stable discretization scheme for the simulation of elastic waves // Proceedings of the 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modeling and Applied Mathematics (IMACS 1997). V. 2. P. 75–80.
4. Drossaert F., Giannopoulos A. Complex frequency shifted convolution PML for FDTD modeling of elastic waves // Wave Motion. 2007. V. 44. P. 593–604.
5. Komatisch D., Martin R. An unsplit convolutional perfectly matched layer improved at grazing incidence for the seismic wave equation // Geophysics. 2008. V. 73, №4. P. T51–T61.
6. Hastings F.D., Schneider J.B., Broschat S.L. Application of the perfectly matched layer (PML) absorbing boundary condition to elastic wave propagation // J. Acoust. Soc. Am. 1996. November. V. 100 (5). P. 3061–3069.

References

1. Karavaev D.A. Parallel'naya realizatsiya metoda chislennogo modelirovaniya volnovykh poley v trehmernykh modelyah neodnorodnyh sred // Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N.I. Lobachevskogo. 2009. № 6 (1). S. 203–209.
2. Glinsky B.M., Karavaev D.A., Kovalevskiy V.V., Martynov V.N. Chislennoe modelirovaniye eksperimental'nye issledovaniya gryazevogo vulkana «Gora Karabetova» vibroseysmicheskimi metodami // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye. 2010. T. 11. S. 95–104.
3. Bihl M., Weiland T. A stable discretization scheme for the simulation of elastic waves // Proceedings of the 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics (IMACS 1997). V. 2. P. 75–80.
4. Drossaert F., Giannopoulos A. Complex frequency shifted convolution PML for FDTD modeling of elastic waves // Wave Motion. 2007. V. 44. P. 593–604.

5. Komatitsch D., Martin R. An unsplit convolutional perfectly matched layer improved at grazing incidence for the seismic wave equation // Geophysics. 2008. V. 73, №4. P. T51–T61.
6. Hastings F.D., Schneider J.B., Broschat S.L. Application of the perfectly matched layer (PML) absorbing boundary condition to elastic wave propagation // J. Acoust. Soc. Am. 1996. November. V. 100 (5). P. 3061–3069.

NUMERICAL SIMULATION OF SEISMIC WAVE PROPAGATION IN A COMPLICATED MEDIUM ON THE HYBRID CLUSTER

Sapetina A.F.

Numerical simulation of elastic wave propagation in 3D inhomogeneous medium is based on the solution of the complete system of elasticity equations. Finite difference method and auxiliary algorithm CFS-PML for the absorption of elastic wave reflections from the boundary of the computational domain are used for solving the problem. A method of parallelization and optimization programs for numerical calculations on the hybrid cluster equipped with general-purpose graphics cards using CUDA and MPI technology is provided.

Keywords: 3D numerical simulation, elastic waves, graphics processing unit (GPU), hybrid cluster, CUDA.