

УДК 550.341

ОРГАНИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛН С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДДИТИВНОГО МЕТОДА ШВАРЦА

М. А. Белоносов¹, К. Костов², Г. В. Решетова³, С. А. Соловьёв¹, В. А. Чеверда¹

Применение преобразования Лагерра по времени к системе уравнений динамической теории упругости дает знакоопределенный пространственный оператор, не зависящий от параметра разделения. Это позволяет организовать параллельные вычисления, опирающиеся на декомпозицию расчетной области с перекрытием с последующим применением аддитивного метода Шварца. На каждом шаге альтернирования по Шварцу в элементарных подобластях система линейных алгебраических уравнений решается независимо, что дает возможность использовать прямой метод, основанный на LU-разложении. Так как матрица не зависит от параметра разделения, это разложение строится только один раз, запоминается в каждой из подобластей и впоследствии используется для различных правых частей. На основе предлагаемого подхода создана научно-исследовательская версия программного обеспечения, ориентированная на использование многопроцессорных вычислительных систем с гибридной архитектурой. Приведены результаты численного моделирования для анализа масштабируемости.

Ключевые слова: преобразование Лагерра, знакоопределенный оператор, аддитивный метод Шварца, параллельные вычисления, масштабируемость.

Введение. Реалистичные постановки численного моделирования сейсмических (упругих) волн в неоднородных средах связаны, как правило, с необходимостью работы с весьма значительными объемами данных, необходимых для описания как упругих параметров среды, так и распространяющихся в ней волновых полей. Для решения такого типа задач наилучшим образом подходит метод декомпозиции целевой области в сочетании с использованием многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью. Декомпозиция осуществляется таким образом, чтобы каждая элементарная подобласть помещалась на отдельном процессорном элементе (ПЭ). При реализации этого подхода ключевой момент состоит в организации эффективного взаимодействия между подобластями. Наиболее распространенный в настоящее время способ организации таких вычислений основывается на явных конечно-разностных схемах с пошаговым обменом между двумя соседними ПЭ или их группами [3, 16, 21]. Подробное описание возникающих при этом трудностей и тщательный сравнительный анализ способов оптимизации вычислений можно найти, например, в работах [4, 14].

Организация эффективных вычислений с использованием явных конечно-разностных схем существенно затруднена необходимостью выполнения на каждом шаге по времени обменов между процессорами и/или их группами. Действительно, эти схемы являются условно-устойчивыми с весьма жестким ограничением на величину шага по времени (условие Куранта) и, следовательно, требуют выполнения значительного числа шагов (как правило, десятков тысяч), на каждом из которых все соседние процессорные элементы должны обмениваться рассчитанными граничными значениями. Альтернативой этому подходу являются методы отделения времени, сводящие исходную гиперболическую задачу к однопараметрическому семейству эллиптических задач, зависящих от параметра разделения. Так, при реализации наиболее известного метода отделения времени на основе преобразования Фурье в качестве такого параметра выступает временная частота ω . Дискретизация полученных эллиптических задач трансформирует их в семейство систем линейных алгебраических уравнений, решение которых и позволяет строить сейсмические волновые поля.

¹ Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН (ИНГГ СО РАН), просп. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск; М. А. Белоносов, мл. науч. сотр., e-mail: BelonosovMA@ipgg.sbras.ru; С. А. Соловьёв, ст. науч. сотр., e-mail: SolovevSA@ipgg.sbras.ru; В. А. Чеверда, зав. лабораторией, e-mail: CheverdaVA@ipgg.sbras.ru

² Московский научный центр фирмы Шлюмберже (SMR), ул. Пудовкина, 13, 119285, Москва; зав. отделом, e-mail: kostov1@slb.com

³ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (ИВМиМГ СО РАН), просп. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; вед. науч. сотр., e-mail: kgv@nmsf.sccc.ru

Как уже было отмечено, наиболее широко используется отделение времени посредством преобразования Фурье. Однако наряду с преимуществами данного подхода, наиболее очевидным из которых является прозрачность физического истолкования получаемого решения, у него имеются по крайней мере два значительных недостатка, существенно затрудняющих его использование для реализации прямых и итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений, получаемых в результате последующей конечномерной дискретизации:

- 1) построенная матрица зависит от частоты ω ; следовательно, ее обращение должно выполняться для каждой частоты заново;
- 2) эта матрица является знаконеопределенной, что существенно затрудняет, а порой и делает невозможной обеспечение сходимости итерационных методов [22].

В настоящей статье предлагается и обосновывается альтернативный подход к отделению времени, использующий преобразование Лагерра [2, 19]. Его выгодными отличиями от преобразования Фурье являются независимость матрицы получаемой системы линейных алгебраических уравнений от параметра разделения и ее строгая знакоопределенность. В отличие от упомянутой работы [2] здесь не решается гигантская система линейных алгебраических уравнений, возникающая в результате конечномерной дискретизации исходных уравнений динамической теории упругости во всей целевой области. Вместо этого выполняется пространственная декомпозиция целевой области с последующим применением аддитивного метода Шварца [5, 8, 12, 20], сходимость которого обеспечивается знакоопределенностью эллиптического оператора, возникающего после применения преобразования Лагерра. Этот метод является итерационным и на каждой итерации требует независимого построения решения в каждой из элементарных подобластей с последующим обменом граничными значениями с соседями. Следовательно, выбирая подходящим образом размер подобласти, можно полностью приписать ее отдельному процессорному элементу или их группе, оперирующей общей памятью, для организации параллельных вычислений. Более того, так как матрица не зависит от параметра разделения, она может быть обращена только один раз для каждой из подобластей и ее обратная использована впоследствии при вычислении решения с различными правыми частями.

1. Постановка задачи. Отделение времени. Рассмотрим двумерную систему уравнений динамической теории упругости второго порядка для источника *центр объемного расширения* с нулевыми начальными данными:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial u_2}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \frac{\partial u_2}{\partial x} + \mu \frac{\partial u_1}{\partial z} \right] + g(x, z) f'(t), \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial u_2}{\partial x} + \mu \frac{\partial u_1}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda \frac{\partial u_1}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_2}{\partial z} \right] + h(x, z) f'(t), \\ u_j|_{t=0} = \frac{\partial u_j}{\partial t}|_{t=0} = 0, \quad j = 1, 2. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь ρ — плотность среды, λ и μ — ее коэффициенты Ламэ, определяющие скорости распространения продольных и поперечных волн $V_p = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}$ и $V_s = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ соответственно. Функции $g(x, z)$ и $h(x, z)$ описывают пространственное распределение источника, а $f(t)$ задает форму излучаемого им импульса. Далее используется импульс Рикера с доминирующей частотой ν_0 :

$$f(t) = \left[1 - 2\pi^2 \nu_0^2 \left(t - \frac{t_0}{\nu_0} \right)^2 \right] \exp \left\{ -\pi^2 \nu_0^2 \left(t - \frac{t_0}{\nu_0} \right)^2 \right\}.$$

1.1. Преобразование Лагерра. Определим интегральное преобразование Лагерра для функции $\phi(t) \in L_2(0, \infty)$:

$$\phi_n = \int_0^\infty \phi(t) (ht)^{-\alpha/2} l_n^\alpha(ht) dt, \quad (2)$$

с формулой обращения [18]

$$\phi(t) = \sum_{n=0}^\infty \phi_n (ht)^{\alpha/2} l_n^\alpha(ht). \quad (3)$$

Здесь $l_n^\alpha(ht)$ — функции Лагерра

$$l_n^\alpha(ht) = \sqrt{\frac{n!}{(n+\alpha)!}} (ht)^{\alpha/2} e^{-ht/2} L_n^\alpha(ht),$$

где h, α — положительное вещественное и целое числа соответственно, а $L_n^\alpha(y)$ — классические стандартизованные многочлены Лагерра [7]:

$$L_n^\alpha(y) = \frac{1}{n!} e^y y^{-\alpha} \frac{d^n}{dy^n} (y^{\alpha+n} e^{-y}).$$

Параметр h является масштабирующим множителем и приводит к растяжению/сжатию функций Лагерра, в то время как параметр α управляет их “сосредоточенностью”: чем меньше α , тем быстрее затухает функция Лагерра (рис. 1).

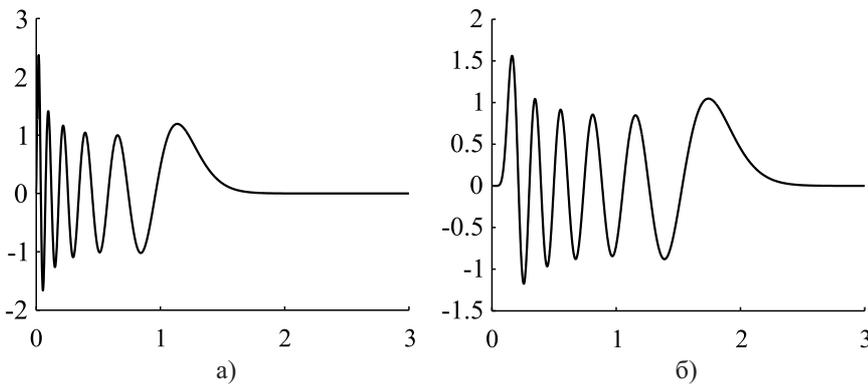


Рис. 1. Функции Лагерра $l_n^\alpha(ht)$ ($n = 10, h = 100$) для различных значений параметра α : а) $\alpha = 5$, б) $\alpha = 20$

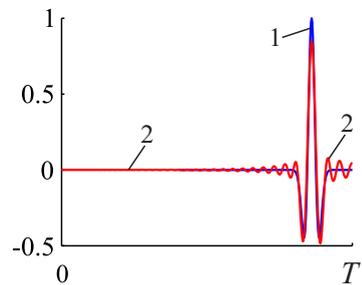


Рис. 2. Представление импульса Рикера в виде ряда по функциям Лагерра

Применение интегрального преобразования Лагерра (2) к системе уравнений динамической теории упругости (1) трансформирует ее в эллиптическую систему уравнений в частных производных второго порядка с отрицательно определенным оператором:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_1^n}{\partial x} + \lambda \frac{\partial u_2^n}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \frac{\partial u_2^n}{\partial x} + \mu \frac{\partial u_1^n}{\partial z} \right] - \varrho \frac{h^2}{4} u_1^n &= \varrho (\hat{u}_1)_{n-1} - g(x, z) f_n; \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial u_2^n}{\partial x} + \mu \frac{\partial u_1^n}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda \frac{\partial u_1^n}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_2^n}{\partial z} \right] - \varrho \frac{h^2}{4} u_2^n &= \varrho (\hat{u}_2)_{n-1} - h(x, z) f_n. \end{aligned}$$

Правые части этой системы определяются рекуррентными соотношениями

$$(\hat{u}_1)_{n-1} = h^2 \sqrt{\frac{n!}{(n+\alpha)!}} \sum_{k=0}^{n-1} (n-k) \sqrt{\frac{(k+\alpha)!}{k!}} u_1^k, \quad (\hat{u}_2)_{n-1} = h^2 \sqrt{\frac{n!}{(n+\alpha)!}} \sum_{k=0}^{n-1} (n-k) \sqrt{\frac{(k+\alpha)!}{k!}} u_2^k.$$

Принципиально важным моментом является выбор необходимого числа функций Лагерра в разложении (3). Исходя из того, что для источника *центр объемного расширения* в однородной трехмерной среде форма волны совпадает с производной от функции источника, используется эмпирический критерий, согласно которому число функций Лагерра N выбирается из условия

$$\int_0^T \left[f'(t-T) - \sum_{n=0}^{N(T)} f_n(ht) {}^{-\alpha/2} l_n^\alpha(ht) \right]^2 dt \leq \varepsilon^2,$$

что гарантирует заданный уровень среднеквадратичной невязки между функцией и ее представлением в виде конечного ряда по полиномам Лагерра на временном промежутке моделирования $(0, T)$. На рис. 2 приведен пример пробного разложения для заведомо недостаточного числа функций Лагерра: линия 1 — импульс Рикера, линия 2 — его приближение рядом по функциям Лагерра.

2. Численная аппроксимация и организация параллельных вычислений. Для организации параллельных вычислений используется метод декомпозиции области с последующей реализацией на его основе аддитивного метода Шварца.

2.1. Аддитивный метод Шварца. Детальное описание аддитивного метода Шварца может быть найдено в работах [5, 8, 20]. В его основе лежит декомпозиция расчетной области на элементарные перекрывающиеся подобласти. Для представления метода вполне достаточно самого простого случая — разбиения на две подобласти D_1 и D_2 с непустым пересечением, как это показано на рис. 3. Опишем поэтапно организацию итерационного процесса аддитивного метода Шварца для решения задачи Дирихле в области D с границей S .

Шаг 0. Выполняется декомпозиция расчетной области D с границей S на две подобласти D_1 и D_2 с непустым пересечением, которая привносит две дополнительные границы: S_1 (правая граница области D_1) и S_2 (левая граница области D_2).

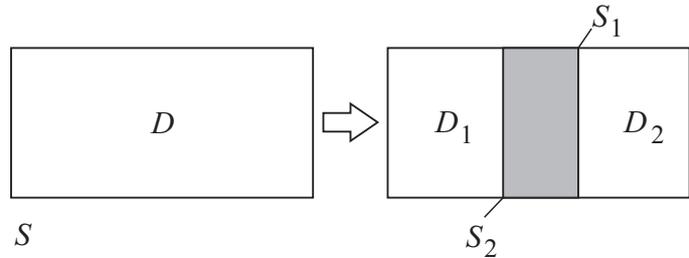


Рис. 3. Декомпозиция расчетной области с перекрытием для организации альтернирований по Шварцу

Шаг 1. В каждой из подобластей решается задача Дирихле, для которой на внешней границе сохраняются исходные данные, в то время как на внутренних границах, порожденных декомпозицией области (границы S_1 и S_2 на рис. 3), берутся произвольные данные (в нашей реализации берутся нулевые условия Дирихле на внутренних границах).

Шаг $k \geq 2$. В каждой из подобластей решается задача Дирихле, причем на внешней границе по-прежнему сохраняются исходные данные, в то время как на S_1 и S_2 в качестве данных Дирихле берутся следы решения, полученного на шаге $k - 1$ соответственно в областях D_2 и D_1 .

В качестве критерия остановки для метода Шварца используется достижение заранее заданного порогового значения следующей величиной, характеризующей относительную изменчивость решения на двух последовательных шагах по времени:

$$E_{rr} = \max \left(\frac{\|u_1^n - u_1^{n-1}\|_\Gamma}{\|u_1^{n-1}\|_\Gamma}, \frac{\|u_2^n - u_2^{n-1}\|_\Gamma}{\|u_2^{n-1}\|_\Gamma} \right), \tag{4}$$

где Γ — объединение всех границ, вводимых декомпозицией области. В приводимых ниже численных экспериментах было выбрано $E_{rr} \leq 10^{-5}$.

2.2. Ограничение расчетной области. Чтобы ограничить расчетную область, используется модификация предложенного в работе [10] метода ее окаймления идеально подходящим слоем, далее PML (аббревиатура от английского Perfectly Matched Layer). Эта модификация предложена и реализована Г. В. Решетовой и В. А. Чевердой (2006) и состоит в последовательном применении преобразования Лагерра к стандартной формулировке PML для системы уравнений динамической теории упругости в скоростях-напряжениях. В итоге исходная система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{h}{2} + d_x(x) \right) u_{11}^n &= \frac{\partial \sigma_1^n}{\partial x} - \rho(\bar{u}_{11})_{n-1}, & \rho \left(\frac{h}{2} + d_z(z) \right) u_{12}^n &= \frac{\partial \sigma_3^n}{\partial z} - \rho(\bar{u}_{12})_{n-1}, \\ \rho \left(\frac{h}{2} + d_x(x) \right) u_{21}^n &= \frac{\partial \sigma_3^n}{\partial x} - \rho(\bar{u}_{21})_{n-1}, & \rho \left(\frac{h}{2} + d_z(z) \right) u_{22}^n &= \frac{\partial \sigma_2^n}{\partial z} - \rho(\bar{u}_{22})_{n-1}, \\ \left(\frac{h}{2} + d_x(x) \right) \sigma_{11}^n &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_1^n}{\partial x} - (\bar{\sigma}_{11})_{n-1} + G(x, z) f_n, & \left(\frac{h}{2} + d_z(z) \right) \sigma_{12}^n &= \lambda \frac{\partial u_2^n}{\partial z} - (\bar{\sigma}_{12})_{n-1}, \\ \left(\frac{h}{2} + d_x(x) \right) \sigma_{21}^n &= \lambda \frac{\partial u_1^n}{\partial x} - (\bar{\sigma}_{21})_{n-1} + H(x, z) f_n, & \left(\frac{h}{2} + d_z(z) \right) \sigma_{22}^n &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_2^n}{\partial z} - (\bar{\sigma}_{22})_{n-1}, \\ \left(\frac{h}{2} + d_x(x) \right) \sigma_{31}^n &= \mu \frac{\partial u_2^n}{\partial x} - (\bar{\sigma}_{31})_{n-1}, & \left(\frac{h}{2} + d_z(z) \right) \sigma_{32}^n &= \mu \frac{\partial u_1^n}{\partial z} - (\bar{\sigma}_{32})_{n-1}, \end{aligned} \tag{5}$$

где $(\bar{u}_{11})_{n-1}$, $(\bar{u}_{12})_{n-1}$, $(\bar{u}_{21})_{n-1}$, $(\bar{u}_{22})_{n-1}$, $(\bar{\sigma}_{11})_{n-1}$, $(\bar{\sigma}_{12})_{n-1}$, $(\bar{\sigma}_{21})_{n-1}$, $(\bar{\sigma}_{22})_{n-1}$, $(\bar{\sigma}_{31})_{n-1}$, $(\bar{\sigma}_{32})_{n-1}$ вычисляются по рекуррентному соотношению

$$(\bar{w})_{n-1} = h \sqrt{\frac{n!}{(n + \alpha)!}} \sum_{k=0}^{n-1} \sqrt{\frac{(k + \alpha)!}{k!}} w^k.$$

Искомые функции внутри PML расщепляются на две составляющие: $u_1 = u_{11} + u_{12}$, $u_2 = u_{21} + u_{22}$; $\sigma_1 = \sigma_{11} + \sigma_{12}$, $\sigma_2 = \sigma_{21} + \sigma_{22}$, $\sigma_3 = \sigma_{31} + \sigma_{32}$. Обеспечение поглощения сейсмической волны осуществляется с помощью специальным образом конструируемыми функциями вдоль осей x и z следующим образом:

$$\begin{pmatrix} d_x(x) \\ d_z(z) \end{pmatrix} = 0, \text{ если } \begin{pmatrix} x \leq a \\ z \leq a \end{pmatrix}, \text{ в противном случае } \begin{pmatrix} d_x(x) \\ d_z(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_0 \left(\frac{x-a}{\delta} \right)^4 \\ d_0 \left(\frac{z-a}{\delta} \right)^4 \end{pmatrix}, \text{ где}$$

$$d_0 = \left| \ln \left(\frac{1}{R} \right) \right| \frac{2 \max_{x,z} (v_p(x,z))}{\delta}.$$

Здесь a — начало PML, δ — его ширина и R — постоянная, определяющая коэффициент отражения от PML (в последующих численных экспериментах она берется равной 10^{-5}).

Теперь умножим каждое нечетное уравнение системы (5) на $d_2 = d_z(z)$, каждое четное уравнение — на $d_1 = d_x(x)$ и после нескольких подстановок получим следующую систему дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{h}{2} + d_2 \right) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(\lambda + 2\mu)}{h/2 + d_1} \frac{\partial u_x^n}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda \frac{\partial u_z^n}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \frac{\partial u_x^n}{\partial x} \right] + \\ & + \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\mu}{h/2 + d_2} \frac{\partial u_x^n}{\partial z} \right] - \rho \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) \left(\frac{h}{2} + d_2 \right) u_x^n = \\ & = \rho \left[\left(\frac{h}{2} + d_2 \right) (\bar{u}_{x1})_{n-1} + \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) (\bar{u}_{12})_{n-1} \right] + \left[\frac{(\bar{\sigma}_{11})_{n-1}}{h/2 + d_1} + \frac{(\bar{\sigma}_{12})_{n-1}}{h/2 + d_2} \right] + \\ & + \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{(\bar{\sigma}_{31})_{n-1}}{h/2 + d_1} + \frac{(\bar{\sigma}_{32})_{n-1}}{h/2 + d_2} \right] - \frac{f(x,z) f_n(h/2 + d_2)}{h/2 + d_1} + \frac{d_1' F(x,z) f_n(h/2 + d_2)}{(h/2 + d_1)^2}, \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{h}{2} + d_2 \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu}{h/2 + d_1} \frac{\partial u_2^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial u_1^n}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda \frac{\partial u_1^n}{\partial x} \right] + \\ & + \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{(\lambda + 2\mu)}{h/2 + d_2} \frac{\partial u_2^n}{\partial z} \right] - \rho \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) \left(\frac{h}{2} + d_2 \right) u_2^n = \\ & = \rho \left[\left(\frac{h}{2} + d_2 \right) (\bar{u}_{21})_{n-1} + \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) (\bar{u}_{22})_{n-1} \right] + \left(\frac{h}{2} + d_2 \right) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(\bar{\sigma}_{31})_{n-1}}{h/2 + d_1} + \frac{(\bar{\sigma}_{32})_{n-1}}{h/2 + d_2} \right] + \\ & + \left(\frac{h}{2} + d_1 \right) \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{(\bar{\sigma}_{21})_{n-1}}{h/2 + d_1} + \frac{(\bar{\sigma}_{22})_{n-1}}{h/2 + d_2} \right] - \delta_z' f_n + \frac{d_2' \delta (x - x_0, z - z_0) f_n}{h/2 + d_1}. \end{aligned} \tag{7}$$

Отметим, что система (6), (7) задает нерасщепленный PML [6] и совпадает с исходной системой второго порядка (1) при нулевых функциях затухания, т.е. вне PML.

2.3. Построение конечно-разностной схемы. Конечно-разностная аппроксимация системы (6), (7) строится с использованием стандартных сдвинутых сеток [26], модифицированных для системы уравнений второго порядка [27]. Шаблон схемы представлен на рис. 4. Искомыми переменными в указанной системе являются u_1^n и u_2^n , однако, кроме того, в нее входит и множество других, вспомогательных переменных, для эффективного вычисления которых и вводятся дополнительные узлы.

В результате аппроксимации исходная краевая задача для системы дифференциальных уравнений в частных производных переходит в систему линейных алгебраических уравнений с разреженной 9-диагональной матрицей. В силу того что преобразование Лагерра приводит к одному и тому же пространственному оператору для всех параметров разделения n , его конечно-разностная аппроксимация также ведет к одной и той же отрицательно определенной матрице.

Таким образом, для каждого параметра разделения n возникает система линейных алгебраических уравнений с одной и той же разреженной отрицательно определенной матрицей, но с разными правыми частями. Отрицательная определенность матрицы гарантирует сходимость аддитивного метода Шварца в описанной в разделе 2.1 формулировке [5, 20]. Тот факт, что матрица системы остается одной для всех параметров разделения, совместно с возможностью управлять размерами подобластей, образованных при

декомпозиции целевой области, открывает возможность использования прямых методов решения систем линейных алгебраических уравнений. Среди всего их чрезвычайно богатого разнообразия мы остановились на использовании LU-разложения матрицы. В каждой из подобластей оно выполняется только один раз и затем используется в ней для всех значений параметра n при решении системы линейных алгебраических уравнений с различными правыми частями.

2.4. LU-разложение. Вычисление и использование LU-разложения для решения семейства систем линейных алгебраических уравнений с различными правыми частями выполняется на OpenMP-компоненте PARDISO библиотеки Intel MKL⁴, ориентированном на системы линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами. Необходимо подчеркнуть, что в результате непосредственной факторизации матриц, имеющих сильно разреженную структуру, получаются LU-факторы с большим числом ненулевых элементов. Это неизбежно ведет к возрастанию памяти, необходимой для хранения данных, а также к возрастанию времени на их обработку, что в итоге увеличивает время решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Существует множество программных пакетов решения СЛАУ прямыми методами [13] на основе алгоритмов переупорядочивания строк и столбцов исходной матрицы, эффективной параллелизации процесса факторизации и обращения LU-факторов. Компонента PARDISO математической библиотеки Intel MKL для переупорядочивания строк и столбцов исходной матрицы использует пакет METIS [15] и на этой основе обеспечивает приемлемый уровень требований к оперативной памяти. Из табл. 1 следует, что:

- 1) для хранения матрицы конечно-разностной аппроксимации оператора, благодаря ее разреженной структуре, нужно несколько десятков мегабайт;
- 2) основной объем памяти необходим для хранения LU-разложения; по сравнению с исходной матрицей, LU-разложение требует на порядок больше памяти.

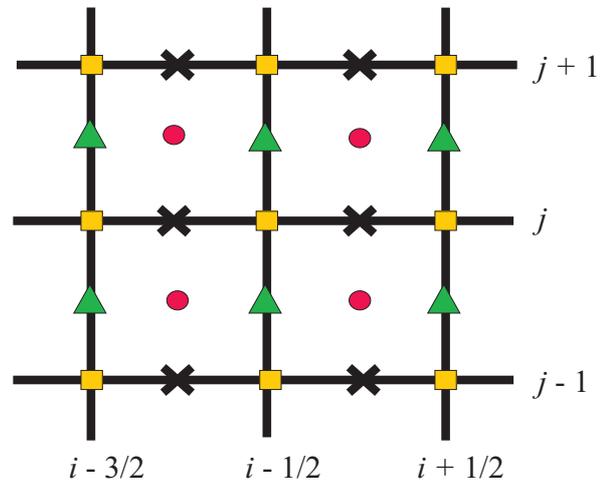


Рис. 4. Шаблон конечно-разностной схемы, используемой для аппроксимации системы (6), (7), \square и \circ соответствуют точкам, в которых вычисляются u_1^n и u_2^n ; вспомогательные переменные $\bar{\sigma}$ вычисляются в точках, обозначенных символами Δ

Таблица 1

Свойства LU-разложения девятидиагональных матриц, возникающих в результате конечно-разностной аппроксимации системы (6), (7)

Размер целевой области, $N_x = N_z$	Размерность матрицы	Ненулевые элементы матрицы	Ненулевые элементы LU-разложения	LU-разложение (Мб)
100	20 200	180 196	1 620 174	12
200	80 400	720 396	8 108 008	62
400	320 800	2 880 796	39 251 440	299
800	1 281 600	11 521 596	187 492 542	1 430
1 600	5 123 200	46 083 196	858 718 476	6 552

Процесс факторизации в Intel[®] MKL PARDISO распараллелен и оптимизирован для работы с многоядерными вычислительными системами с общей памятью (OpenMP). Высокая производительность PARDISO на архитектуре Intel достигается также за счет использования компонента Intel[®] MKL BLAS. Кроме того, в PARDISO существует и широкий набор дополнительных возможностей, предусматривающих, в частности, применение двух алгоритмов факторизации: Left-Looking [23] и Two-level [24, 25]. Первый из них эффективно работает на малом числе потоков, второй — на большом, 16 и более потоков. Для решения больших СЛАУ в компоненте PARDISO существует возможность использования жестко-

⁴ http://software.intel.com/sites/products/documentation/doclib/mkl_sa/11/mklman/index.htm

го диска (функциональность Out-Of-Core). Указанный алгоритм значительно эффективнее алгоритма использования жесткого диска оперативной системой (SWAP) и позволяет решать СЛАУ с размерами LU-факторов, превышающих оперативную память (RAM) в 5–10 раз.

2.5. Организация параллельных вычислений. Наибольшее распространение в настоящее время получили высокопроизводительные вычислительные системы с распределенной памятью, или архитектуры MPP (Massive Parallel Processing). Такие системы строятся из отдельных модулей, содержащих один или несколько процессоров, каждый из которых имеет доступ к общему полю оперативной памяти в рамках данного узла, причем каждый из процессоров, как правило, является многоядерным, т.е. состоит из нескольких “вычислителей”. Таким образом, современные вычислительные системы имеют гибридную архитектуру и организованы как совокупность узлов с распределенной памятью (MPP-архитектура), каждый из которых является вычислительной системой с общей памятью (архитектура SMP — Shared Memory Parallel). Предлагаемый численный метод ориентирован именно на такую архитектуру, легко адаптируется для эффективного использования на любом кластере и реализуется поэтапно:

1) декомпозиция расчетной области на элементарные подобласти такой размерности ($N_x \times N_z$), которая позволяет хранить LU-декомпозицию в общей оперативной памяти (shared memory) узла (табл. 1);

2) использование PARDISO MKL для эффективной организации параллельных вычислений при решении соответствующей системы линейных алгебраических уравнений на данном узле с использованием OpenMP (SMP-архитектура);

3) организация обменов между подобластями при выполнении альтернирований по Шварцу с использованием библиотеки MPI (MPP-архитектура).

Схема организации вычислений представлена на рис. 5. Зеленым (цифра 1) отмечены налегания двух, а красным — четырех соседних подобластей (цифра 2). Стрелками обозначены направления обменов между узлами (MPI). Численные эксперименты выполнялись на вычислительной системе с гибридной параллельной архитектурой, состоящей из объединенных в узлы групп многоядерных процессоров над общим полем памяти. На каждый узел при этом приходится по 8 Гб RAM, что позволяет использовать декомпозицию расчетной подобласти на квадраты из 800×800 узлов.

3. Численные эксперименты: описание и анализ. Численные эксперименты выполнялись на вычислительной системе “Чебышев” Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова с гибридной параллельной архитектурой: 519 узлов, каждый из которых состоит из двух четырехъядерных процессоров и имеет 8 Гб общей оперативной памяти. Как следует из табл. 1, это позволяет использовать декомпозицию расчетной подобласти на квадраты, состоящие из 800×800 узлов.

Первая серия численных экспериментов была направлена на определение оптимальных параметров метода. При этом рассматривалась простейшая ситуация — однородная упругая среда, параметры которой в некотором смысле являются характерными для задач сейсморазведки, а именно скорость продольных волн $V_p = 2500$ м/с, скорость поперечных волн $V_s = 2000$ м/с и плотность $\rho = 2000$ кг/м³. В качестве функции источника был выбран импульс Рикера с доминирующей частотой 30 Гц, также характерной для сейсмических наблюдений. Для исходной системы уравнений применялось преобразование Лагерра при $h = 300$, $\alpha = 5$. Использовалось 450 функций Лагерра для построения решения на временном интервале 3 с. Численное моделирование выполнялось внутри квадрата 1000×1000 м. Верхняя его граница задавалась свободной от напряжений, а для трех остальных строились идеально подходящие поглощающие слои (PML) в соответствии с разделом 2.2.

3.1. Зависимость числа итераций от ширины перекрытия. Прежде всего была проанализирована зависимость числа альтернирований по Шварцу от ширины перекрытия. Результаты приведены в табл. 2. Как видно из приведенных результатов, оптимальным является перекрытие в 25 узлов, которое и было использовано в дальнейшем.

Следующая серия численных экспериментов была ориентирована на изучение масштабируемости ал-

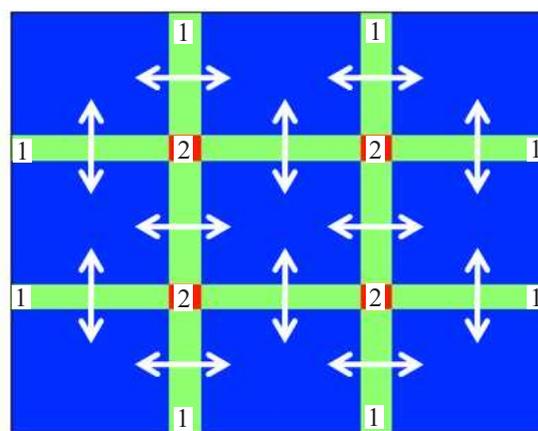


Рис. 5. Организация параллельных вычислений на гибридной архитектуре с использованием альтернирований по Шварцу

горитма, при этом была оценена как слабая (weak scalability), так и сильная масштабируемость (strong scalability) [9].

3.2. Слабая масштабируемость (weak scalability). Способ оценки слабой масштабируемости представлен на рис. 6.

Фиксируется загрузка одного узла, т.е. размерность элементарной подобласти, и увеличивается размерность всей целевой области. Тем самым увеличивается число узлов, вовлеченных в вычисления при сохранении постоянной загрузки каждого узла. За меру слабой масштабируемости выбирается величина $eff_{weak}(N) = \frac{T(N)}{T(N_0)}$, где $T(N)$ — время решения задачи при использовании N узлов, а $T(1)$ — время решения на одном узле при условии, что размерность задачи возрастает ровно в N раз (рис. 6). Идеальная слабая масштабируемость соответствует $eff_{weak}(n) \equiv 1$, т.е. при увеличении размера целевой области с одновременным сохранением загрузки процессорных элементов время вычислений не изменяется.

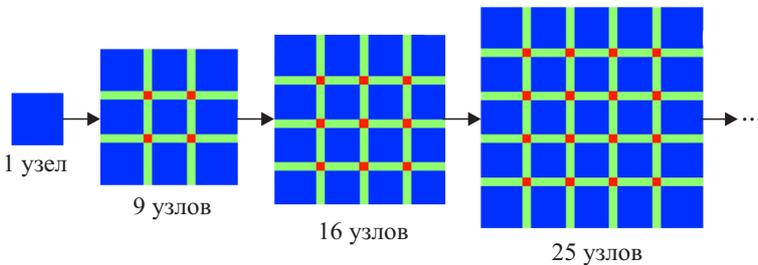


Рис. 6. Вычисление слабой масштабируемости: сохраняется загрузка каждого узла при увеличении размерности задачи

Численные эксперименты для оценки слабой масштабируемости выполнялись для той же самой однородной среды и того же самого импульса в источнике, что и в предыдущих численных экспериментах, с использованием такого же количества полиномов Лагерра. На один вычислительный узел помещалась элементарная область из 800×800 ячеек конечно-разностной сетки. Впоследствии число узлов, вовлеченных в вычисления, увеличивалось, однако размер элементарной области оставался неизменным — 800×800 ячеек. На рис. 7 приведена кривая $T(N)/T(9)$, характеризующая изменение времени счета при увеличении размера расчетной области при фиксированной загрузке процессора. Как видно из рисунка, наблюдаются незначительные вариации функции $eff_{weak}(n)$ в окрестности единицы, что свидетельствует о весьма хорошей слабой масштабируемости данного алгоритма и созданного на его основе программного обеспечения.

3.3. Сильная масштабируемость (strong scalability). Схематично способ оценки сильной масштабируемости приведен на рис. 8. В отличие от слабой масштабируемости здесь фиксируется размер целевой области (размер задачи) и увеличивается число процессорных элементов, вовлеченных в вычисления. Количественной характеристикой сильной масштабируемости является функция

$$eff_{strong}(N) = \frac{T(N)}{N_0 \times T(N_0)}, \tag{8}$$

Таблица 2
Зависимость количества альтернирований по Шварцу от ширины перекрытия

Ширина перекрытия (м)	Ширина перекрытия (количество узлов)	Число итераций
30	15	5
40	20	4
50	25	3
70	35	3

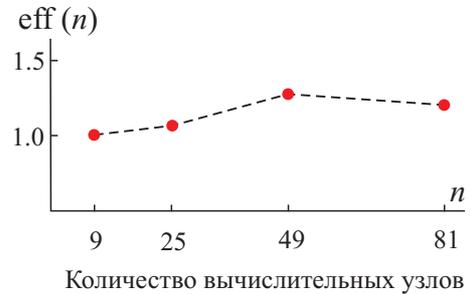


Рис. 7. Изменение времени счета при увеличении размера расчетной области (слабая масштабируемость алгоритма)

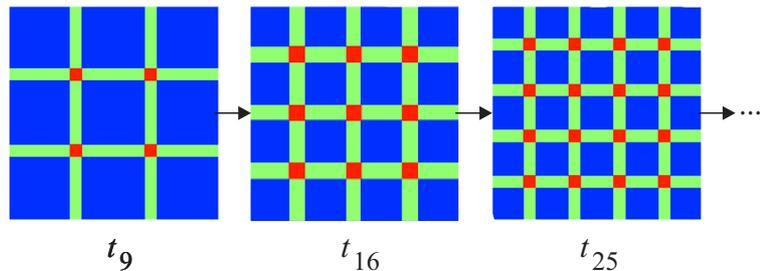


Рис. 8. Вычисление сильной масштабируемости: сохраняется размер общей расчетной области при увеличении числа вовлеченных процессоров узлов

где N_0 — некоторое фиксированное начальное число процессорных элементов. Для идеальной сильной масштабируемости должна наблюдаться линейная зависимость времени вычислений от количества используемых процессорных элементов, т.е. $T(N) = \alpha N^{-1}$, где α — некоторый коэффициент пропорциональности. Таким образом, для идеальной сильной масштабируемости имеем $\text{eff}_{\text{strong}}(N) = N^{-1}$.

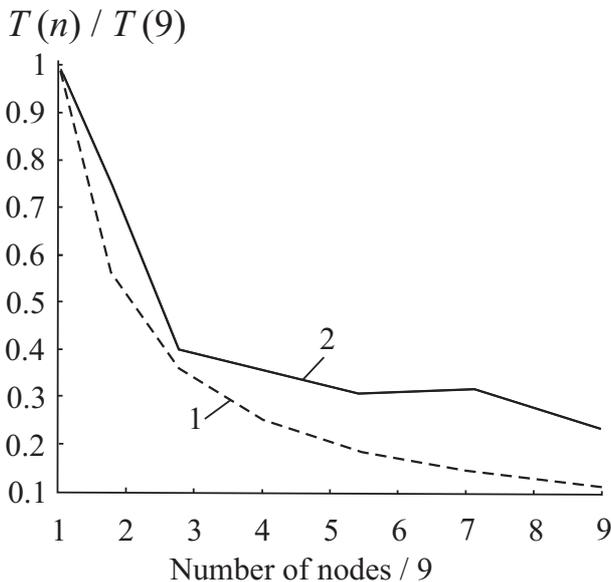


Рис. 9. Сильная масштабируемость алгоритма: линия 1 — идеальная масштабируемость, линия 2 — экспериментально найденная сильная масштабируемость алгоритма

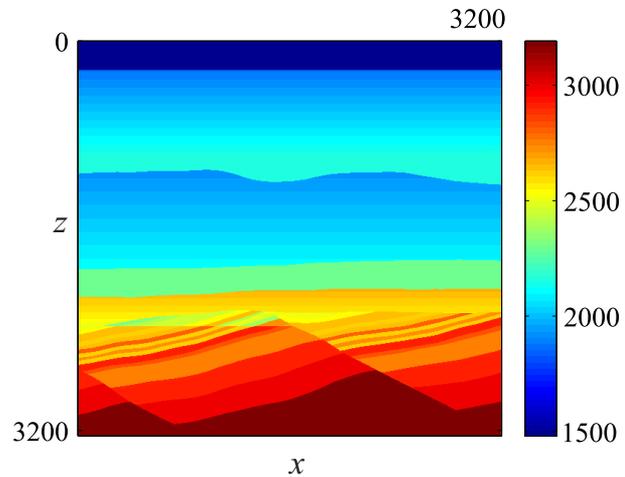


Рис. 10. Двумерная модель Gullfaks. Распределение скорости распространения продольных волн

Численные эксперименты для оценки сильной масштабируемости выполнялись для той же самой постановки, что и раньше (раздел 3.2) для целевой области 2400×2400 точек, состоящей из девяти элементарных подобластей из 800×800 точек, каждая из которых помещается на один вычислительный узел.

Результат вычисления функции, задаваемой соотношением (8), представлен на рис. 9 (линия 2) в сравнении с идеальной масштабируемостью (линия 1). Полученные результаты показывают приемлемое качество сильной масштабируемости алгоритма.

4. Численное моделирование для реалистичной модели среды. В заключение мы представим результаты численных экспериментов, выполненных для представленного на рис. 10 участка модели Gullfaks, описывающей одно из реальных месторождений Северного моря [11].

Источник типа *центр объемного расширения*, излучающий импульс Рикера с доминирующей частотой 30 Гц, расположен в точке с координатами (1620 м, 20 м).

Конечно-разностная аппроксимация выполнена на равномерной сдвинутой сетке с постоянным шагом $h_x = h_z = 2$ м, что соответствует 25 узлам на минимальную длину волны. Моделирование проведено до момента времени $T = 3$ сек. с использованием 450 функций Лагерра. Расчетная область разбивается на 9 подобластей (3×3) с шириной перекрытия 50 м, т.е. 25 узлов, что соответствует оценкам, полученным на модельных расчетах. Для получения решения с невязкой $E_{rr} \leq 10^{-5}$ (см. (4)) потребовалось выполнение 10 альтернирований по Шварцу.

Результаты моделирования в виде последовательных моментальных снимков волнового поля приведены на рис. 11.

Заключение. Представленный в работе алгоритм численного моделирования сейсмических волновых полей в неоднородных средах ориентирован на использование аддитивного метода Шварца на основе метода декомпозиции расчетной области на элементарные подобласти с перекрытием. Он обладает весьма гибкой структурой и может быть реализован на широком классе вычислительных систем с гибридной архитектурой. Текущая реализация ориентирована на наиболее распространенные конфигурации: совокупность многопроцессорных/многоядерных вычислительных узлов с общей оперативной памятью, объединенных межпортовым коммутатором InfiniBand для обмена данными между параллельными процессами на отдельных узлах. На каждом из узлов под управлением OpenMP решается система линейных алгебраических уравнений для одной из элементарных подобластей с помощью решателя PARDISO из

библиотеки Intel® Math Kernel Library (Intel® MKL). Экспериментально оцененная на тестовых расчетах масштабируемость алгоритма и созданного программного обеспечения подтверждает перспективность его использования и для численного моделирования волновых процессов в трехмерно неоднородных средах, причем не только для сейсмических, но и для электромагнитных полей, в частности, для решения задач наземной электроразведки и индукционного каротажа.

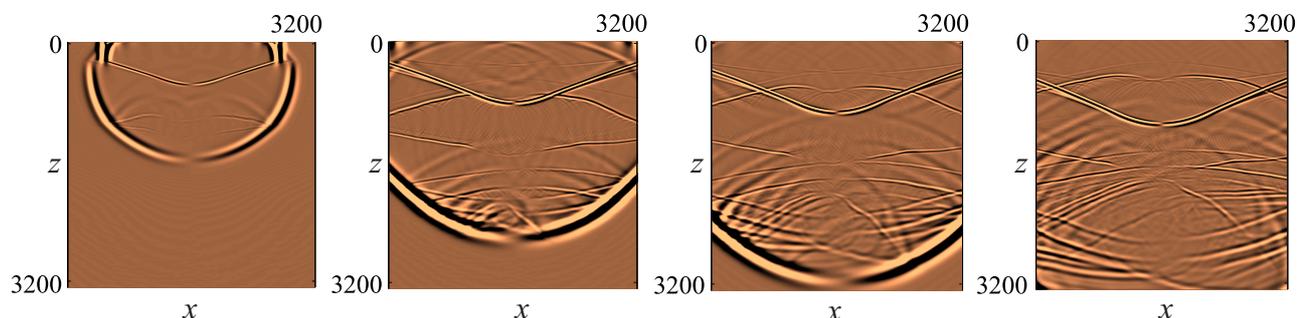


Рис. 11. Результаты численного моделирования: серия моментальных снимков горизонтальной компоненты вектора смещений для модели Gullfaks

Весьма важным преимуществом данного метода является его *квазилокальность*, определяемая независимостью процесса построения решения в каждой из элементарных подобластей, возникающих в результате декомпозиции исходной расчетной области. На этой основе может быть весьма естественным образом реализовано локальное измельчение сеток для описания тонкой структуры среды, в частности строения кавернозно-трещиноватых резервуаров [3, 17], согласование сеток для описания волновых процессов с учетом локальных анизотропных включений [1] и комплексирование разных вычислительных шаблонов в локальных пространственных областях.

В заключение отметим, что использование LU-разложения не является единственно возможным способом решения получаемой в результате аппроксимации дифференциальной постановки системы линейных алгебраических уравнений. В частности, более экономным представляется использование разложения Холецкого для внутренних подобластей, не содержащих PML, и LU-разложения для граничных областей. Весьма перспективным здесь могло бы быть и использование приближения разреженных матриц матрицами с более низким рангом [28].

Выражение признательности. Данное исследование выполнено совместно с Московским научным центром фирмы Шлюмберже, частично поддержано РФФИ (коды проектов 11-05-00947 и 12-05-31008) и грантом Президента РФ МК-47.2011.5. Мы искренне благодарны сотрудникам Новосибирского отделения фирмы Intel (группа MKL) за помощь в организации эффективных вычислений при использовании решателя PARDISO из библиотеки Intel® Math Kernel Library (Intel® MKL). Мы благодарны фирме StatOil за разрешение воспользоваться синтетической сейсмогеологической моделью Gullfaks.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вишневецкий Д.М., Лисица В.В., Чеверда В.А. Комбинирование конечно-разностных схем для моделирования волновых процессов в упругих средах, содержащих анизотропные слои // Сибирский журнал вычислительной математики. 2012. **15**, № 5. 175–181.
2. Конюх Г.В., Михайленко Б.Г. Применение интегрального преобразования Лагерра при решении динамических задач сейсмологии // Тр. ИВМиМГ СО РАН. Сер. Математическое моделирование в геофизике. 1998. № 5. 106–123.
3. Костин В.И., Лисица В.В., Решетова Г.В., Чеверда В.А. Конечно-разностный метод численного моделирования распространения сейсмических волн в трехмерно-неоднородных разномасштабных средах // Вычислительные методы и программирование. 2011. **12**, № 2. 85–93.
4. Левченко В.Д. Асинхронные алгоритмы как способ достижения 100% эффективности вычислений // Информационные технологии и вычислительные системы. 2005. № 1. 68–75.
5. Мацюжин А.М., Непомнящих С.В. Метод альтернирования Шварца в подпространствах // Изв. высших учебных заведений. 1985. **29**, № 10. 61–66.
6. Решетова Г.В., Чеверда В.А. Использование преобразования Лагерра для построения идеально подходящих поглощающих слоев без расщепления // Математическое моделирование. 2006. **18**, № 10. 91–101.
7. Суетин П.К. Классические ортогональные многочлены. М.: Наука, 1974.
8. Chan T., Mathew T.P. Domain decomposition // Acta Numerica. 1994. **3**. 61–143.

9. *Colella P., Bell J., Keen N., Ligocki T., Lijewski M., van Straalen B.* Performance and scaling of locally-structured grid methods for partial differential equations // *Journal of Physics: Conference Series*. 2007. **78**. 012013.
10. *Collino F., Tsogka C.* Application of the PML absorbing layer model to the linear elastodynamic problem in anisotropic heterogeneous media // *Geophysics*. 2001. **66**, N 1. 294–307.
11. *Fossen H., Hesthammer J.* Structural geology of the Gullfaks Field, northern North Sea // *Geological Society. London. Special Publications*. 1998. **127**. 231–261.
12. *Gander M., Haloern L., Nataf F.* Optimized Schwarz methods // *Proc. of 12th Int. Conf. on Domain Decomposition Methods*. Chiba, 2001. 15–27.
13. *Gould N.I.M., Hu Y., Scott J.A.* A numerical evaluation of sparse direct solvers for the solution of large sparse, symmetric linear systems of equations. Technical Report RAL-TR-2005-005. Rutherford Appleton Laboratory. Chilton, 2005.
14. *Graves R.W.* Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences // *Bull. of the Seismological Society of America*. 1996. **86**, N 4. 1091–1106.
15. *Karypis G., Kumar V.* A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // *SIAM J. on Scientific Computing*. 1998. **20**, N 1. 359–392.
16. *Korneev V.I., Kostin V.I., Kovalevsky V.V., Malyshkin V.E., Tcheverda V.A., Vishnevsky D.M.* Modelling of seismic waves propagation for 2D media (direct and inverse problems) // *Lecture Notes in Computer Sciences*. Vol. 1277. 1997. 350–357.
17. *Kostin V.I., Lisitsa V.V., Reshetova G.V., Tcheverda V.A.* Simulation of seismic waves propagation in multiscale media: impact of cavernous/fractured reservoirs // *Lecture Notes in Computer Sciences*. Vol. 7133. 2012. 54–64.
18. *McCully J.* The Laguerre transform // *SIAM Review*. 1960. **2**, N 3. 185–191.
19. *Mikhailenko B.G., Mikhailov A.A., Reshetova G.V.* Numerical viscoelastic modeling by the spectral Laguerre method // *Geophysical Prospecting*. 2003. **51**. 37–48.
20. *Nepomnyashchikh S.V.* Domain decomposition methods // *Radon Series Comput. Appl. Math.* 2007. **1**. 81–159.
21. *Pissarenko D., Reshetova G., Tcheverda V.* 3D finite-difference synthetic acoustic log in cylindrical coordinates: parallel implementation // *J. of Computational and Applied Mathematics*. 2010. **234**, № 6. 1766–1772.
22. *Plessix R.E.* A Helmholtz iterative solver for 3D seismic-imaging problems // *Geophysics*. 2007. **72**, N 5. SM185–SM194.
23. *Schenk O., Gartner K., Fichtner W.* Efficient sparse LU factorization with left-right looking strategy on shared memory multiprocessors // *BIT*. 2000. **240**, N 1. 158–176.
24. *Schenk O., Gartner K.* Sparse factorization with two-level scheduling in PARDISO // *Proc. of the 10th SIAM Conf. on Parallel Processing for Scientific Computing*. Portsmouth, 2001.
25. *Schenk O., Gartner K.* Two-level scheduling in PARDISO: improved scalability on shared memory multiprocessing systems // *Parallel Computing*. 2002. **28**. 187–197.
26. *Virieux J.* P-SV wave propagation in heterogeneous media: velocity–stress finite-difference method // *Geophysics*. 1986. **51**, N 4. 889–901.
27. *Zahradnik J., Priolo E.* Heterogeneous formulations of elastodynamic equations and finite-difference schemes // *Geophysical Journal International*. 1995. **120**, N 3. 663–676.
28. *Zhang Z., Zha H., Simon H.* Low-Rank approximation with sparse factors: basic algorithms and error analysis // *SIAM J. of Matrix Analysis and Applications*. 1999. **23**, N 3. 706–727.

Поступила в редакцию
27.09.2012
