

1. Тема работы

Численное моделирование распространения сейсмических волн в вулканических средах на суперЭВМ

2. Состав коллектива исполнителей

Сапетина Анна Федоровна, аспирант ИВМиМГ

3. Гранты

16-07-00434 Разработка алгоритмического и программного обеспечения экзафлопсных суперЭВМ на основе интегрального подхода. Руководитель: Глинский Б.М. Срок: 2015 – 2017

4. Научное содержание работы

Постановка задачи

В данной работе проводится сравнение эффективности параллельной реализации двух трехмерных алгоритмов для гибридного суперкомпьютера, оснащенного графическими ускорителями. Исследуемые алгоритмы осуществляют численное моделирование сейсмических волновых полей в 3D упругих средах, характерных для вулканических структур, на основе разных постановок динамической теории упругости.

Численное моделирование распространения сейсмических волн в сложно построенных упругих неоднородных средах можно проводить на основе решения полной системы уравнений теории упругости с соответствующими начальными и граничными условиями, записанной в терминах вектора скоростей смещений $\vec{u} = (u, v, w)^T$ и тензора напряжений $\vec{\sigma} = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz})^T$. В качестве области моделирования выступает изотропная 3D неоднородная сложно построенная упругая среда, представляющая собой параллелепипед, одна из граней которого является свободной поверхностью (плоскость $z = 0$). Рассмотрим прямоугольную декартову систему координат так, что ось Oz направлена вертикально вниз, а оси Ox и Oy лежат на свободной поверхности. Уравнения в векторной форме могут быть представлены в следующем виде:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = [A] \vec{\sigma} + \vec{F}(t, x, y, z), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{\sigma}}{\partial t} = [B] \vec{u}, \quad (2)$$

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

где t — время, $\rho(x, y, z)$ — плотность, $\lambda(x, y, z)$, $\mu(x, y, z)$ — параметры Ламе.

Предполагается, что параметры упругой среды зависят от трех пространственных переменных X , Y и Z .

Начальные условия имеют вид:

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

$$u(x, y, z)|_{t=0} = 0, \quad v(x, y, z)|_{t=0} = 0, \quad w(x, y, z)|_{t=0} = 0. \quad (3)$$

В качестве граничных условий на свободной поверхности выступают:

$$\sigma_{xz}|_{z=0} = 0, \quad \sigma_{yz}|_{z=0} = 0, \quad \sigma_{zz}|_{z=0} = 0. \quad (4)$$

При численном моделировании на основе решения системы (1–4) на каждом шаге по времени требуется хранить в памяти ЭВМ как минимум 12 трехмерных массивов содержащих информацию о неизвестных $\vec{u} = (u, v, w)^T$, $\vec{\sigma} = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz})^T$ и о параметрах среды ρ , λ , μ . При моделировании «больших» 3D сред в таком случае для проведения расчета требуется большой объем оперативной памяти.

Это количество можно сократить, перейдя к постановке динамической теории упругости в терминах вектора смещений $\vec{U} = (U, V, W)^T$ и уменьшив, таким образом, количество неизвестных. В этом случае для той же моделируемой области основные уравнения будут выглядеть следующим образом:

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{U}}{\partial t^2} = [C] \vec{U} + \vec{F}(t, x, y, z), \quad (5)$$

$$C = \begin{bmatrix} (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) & (\lambda + \mu) \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} & (\lambda + \mu) \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \\ (\lambda + \mu) \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} & (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) & (\lambda + \mu) \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ (\lambda + \mu) \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} & (\lambda + \mu) \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} & (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \end{bmatrix}$$

В обеих постановках предполагается, что правая часть (массовая сила) имеет следующий вид: $\vec{F}(t, x, y, z) = F_x \vec{i} + F_y \vec{j} + F_z \vec{k}$, где \vec{i} , \vec{j} , \vec{k} — единичные направляющие векторы координатных осей.

Современное состояние проблемы

Разработка эффективного программного инструментария для современных суперкомпьютерных систем отдельная сложная научная задача. Ее решение становится все более зависимым от архитектуры суперкомпьютера, подчиняя себе не только выбор алгоритмов для решения поставленной задачи под вычислительную архитектуру, но требующее со-дизайна алгоритмов на всех стадиях решения задачи – от постановки до выбора инструментов разработки. Понятие со-дизайна в контексте математического моделирования физических процессов понимается как построение физико-математической модели явления, численного метода, параллельного алгоритма и его программной реализации, эффективно использующей архитектуру суперкомпьютера. Со-дизайн успешно применяется при разработке программного обеспечения для моделирования различных физических процессов на суперкомпьютерах. Например, при решении задач физики плазмы, астрофизики и многих других. При таком подходе актуальным становится проведение сравнения эффективности использования различных физических и математических постановок при разработке программного обеспечения.

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

В случае трехмерных динамических задач теории упругости наиболее «гибким» и широко применяемым является конечно-разностный метод. Для решения задачи (1–4) в данной работе используется хорошо себя зарекомендовавшая конечно-разностная схема Верье на сдвинутых сетках. Расчет сеточных коэффициентов ρ , λ , μ , которые могут иметь разрывы, проводится на основе интегральных законов сохранения. Используемая конечно-разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству. Для решения задачи в терминах смещений используется аналогичная конечно-разностная схема на сдвинутых сетках. Рассматриваются только равномерные сетки.

Графические ускорители хорошо подходят для решения конечно-разностных уравнений, благодаря своей массивно-параллельной архитектуре и быстрому доступу к памяти устройства. В данной работе разработка программ велась с учетом особенностей архитектуры гибридного кластера с графическими ускорителями на базе вычислительных узлов HP SL390s G7. Программная реализация написана на языке программирования C++ с использованием технологий CUDA (Compute Unified Device Architecture) и MPI (Message Passing Interface), которые дают возможность задействовать одновременно большое количество параллельных процессов и в итоге получить максимальную эффективность. Так как методы решения сравниваемых постановок задачи теории упругости имеют сходную природу, а также для корректности сравнения, адаптация и оптимизация этих методов проводилась одинаковыми путями.

Для распараллеливания используется декомпозиция расчетной области на слои вдоль направления одной из координатных осей. Каждый слой рассчитывается на отдельном узле, где, в свою очередь, он разбивается еще на подслои вдоль другой координатной оси (для обеспечения возможности лучшего масштабирования) по числу графических ускорителей на узле. Для обмена между вычислительными узлами используется асинхронная неблокированная передача данных с помощью соответствующих функций MPI. Обмен между графическими картами производится средствами CUDA.

Расчетная область на каждом GPU разбивается на трехмерную сетку блоков, размер которых по компоненте x должен быть кратен длине $warp$ 'а (количество физически одновременно исполняющихся нитей на GPU). Конкретные размеры блока подбираются эмпирически для каждого алгоритма.

Проведена оптимизация работы с глобальной памятью, задействованы константная и разделяемая памяти GPU.

Для анализа эффективности параллельной реализации двух трехмерных постановок динамической теории упругости проведена профилировка на GPU; проведено имитационное моделирование исполнения программ на большом числе вычислительных ядер.

Полученные результаты

В рамках методики со-дизайна проведено сравнение разработанных эффективных параллельных реализаций решения задачи динамической теории упругости, записанной в терминах скоростей смещения и напряжения и в терминах смещений для гибридного суперкомпьютера, оснащенного графическими ускорителями. Исследовано время работы созданных параллельных программ. Масштабируемость полученных алгоритмов была проверена с использованием системы моделирования AGNES.

На основе полученных результатов можно дать рекомендации по предпочтению в использовании подхода, основанного на расчете смещений. Хотя он дает небольшой выигрыш во времени по сравнению с подходом, основанном на расчете скоростей смещения и напряжения, но позволяет решать большие 3D задачи динамической теории упругости на существенно меньшем числе графических ускорителей за приемлемое время.

Иллюстрации, визуализация результатов

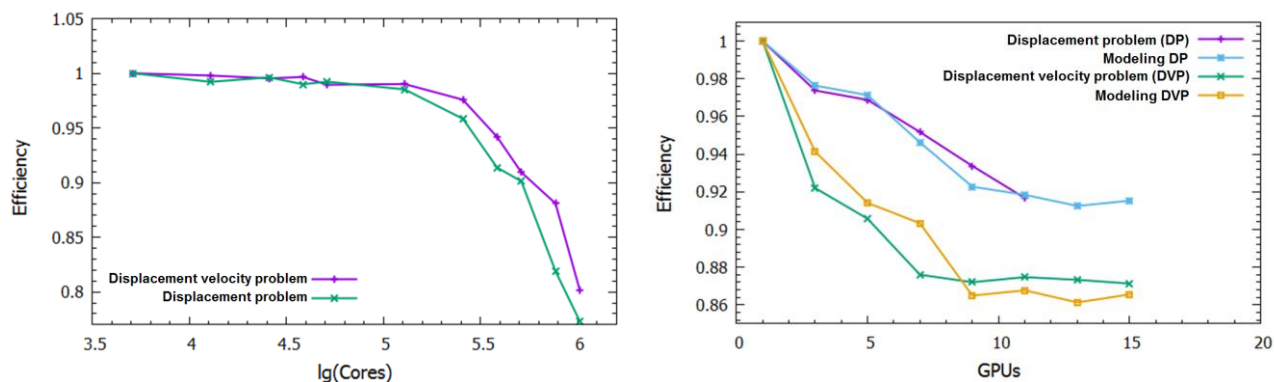


Рис. 1. Исследование масштабируемости геофизического кода для двух подходов к решению (горизонтальная ось – в логарифмическом масштабе).

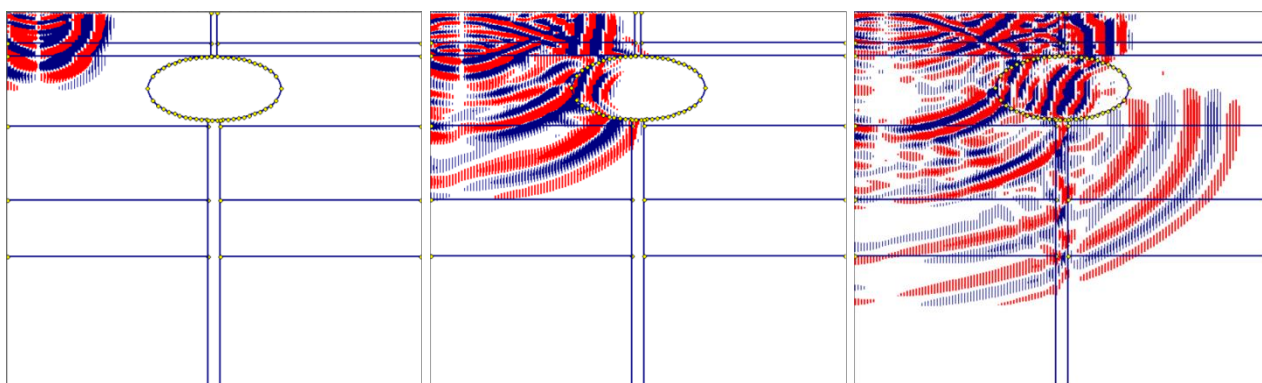


Рис. 2. Снимки компоненты u вектора смещений, плоскость Oxz для приближенной геофизической модели вулкана Эльбрус с источником типа центр давления, располагающимся вблизи свободной поверхности в центре, в разные моменты времени.

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы:

Частичная отладка разработанных программ и часть расчетов в ходе работы проведена на кластере ИВЦ НГУ.

6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Глинский Б.М., Мартынов В.Н., Сапетина А.Ф. Технология суперкомпьютерного 3D моделирования сейсмических волновых полей в сложно построенных средах // Вестник Южно-Уральского Государственного Университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2015. Т. 4, № 4, С. 101–116 (Импакт-фактор РИНЦ 2016 0,302)
2. Глинский Б.М., Мартынов В.Н., Сапетина А.Ф. 3D-моделирование сейсмических волновых полей в средах, характерных для вулканических структур // Математические заметки СВФУ. 2015. Т. 22, № 3(87), С. 84–98 (Импакт-фактор РИНЦ 2016 0,178)
3. Sapetina A.F. Development of algorithms and software for modeling volcanic structures on the hybrid cluster // Abstracts. The International conference "Advanced mathematics, computations and applications – 2014". Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia. June 8–11, 2014 / Novosibirsk: Academizdat, 2014. – С. 36
4. Глинский Б.М., Мартынов В.Н., Сапетина А.Ф. Технология суперкомпьютерного 3D моделирования сейсмических волновых полей в сложнопостроенных средах // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2015): труды международной научной конференции (31 марта – 2 апреля 2015 г., г. Екатеринбург) / Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. – С. 77–87
5. Глинский Б.М., Мартынов В.Н., Сапетина А.Ф. 3D моделирование сейсмических волновых полей в средах, характерных для вулканических структур //

Дифференциальные уравнения и математическое моделирование: Тезисы докладов / Улан-Удэ: Изд-во ВСГУТУ. 2015. – С. 89

6. Сапетина А.Ф. Сравнение эффективности применения различных математических постановок для суперкомпьютерного 3D моделирования сейсмических волновых полей // Суперкомпьютерные дни в России. Труды международной конференции / М.: Изд-во МГУ. 2016. – С. 985–995.
7. Sapetina A.F. Supercomputer-aided comparison of the efficiency of using different mathematical statements of the 3D geophysical problem // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center, Series: Numerical Analysis. 2016. N. 18, p. 57–66
8. Boris M. Glinskiy, Igor M. Kulikov, Igor G. Chernykh, Alexey V. Snytnikov, Anna F. Sapetina, Dmitry V. Weins The Integrated Approach to Solving Large-Size Physical Problems on Supercomputers // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции / М.: Изд-во МГУ. 2017. – С. 432–443.