Научный Отчет к.ф.-м.н. Терехова Андрея Валерьевича,

Новосибирск государственный университет, Новосибирск – 2014 г.

Наименование работы: Разработка спектрально-разностного параллельного алгоритма для моделирования динамики распространения сейсмических волн в верхней части разреза.

Состав коллектива исполнителей:

1. Терехов Андрей Валерьевич, к.ф.м.н., научный сотрудник ИВМиМГ СО РАН, email: andrew.terekhov@mail.ru.

Аннотация. В рамках проекта предложен численно-аналитический метод моделирования акустических и упругих волновых полей для моделей сред, включающих переменный рельеф местности. Переход от начально-краевой задачи к серии краевых задач с одним и тем же эллиптическим оператором осуществляется посредством интегрального преобразования Лагерра по времени. Серия таких краевых задач может быть решена численно посредством сеточных алгоритмов и допускает эффективную параллельную реализацию, в том числе для тысяч процессоров. Вычисление коэффициентов разложения ряда Фурье-Лагерра с достаточной точностью обеспечивает устойчивость всего вычислительного процесса. Вычислительным ядром предлагаемого алгоритма является параллельная процедура решения СЛАУ, разработанная на основе быстрых предобуславливающих алгоритмов и метода декомпозиции областей. Экономичность предобусловливающей процедуры по числу арифметических действий достигается за счет использования быстрого Фурье преобразования и алгоритма дихотомии в рамках метода разделения переменных. Метод декомпозиции областей позволяет эффективно рассчитывать волновые поля для моделей сред, для которых можно выделить макроподобласти с небольшими вариациями скоростей. Параллельный алгоритм дихотомии, позволил в рамках метода декомпозиции областей (Schur Complement) реализовать новую предобусловливающую процедуру, существенно уменьшающую как число итераций, так и общее время решения разностных уравнений. Эффективная параллельная реализация метода декомпозиции областей обеспечивает высокую скорость расчетов для акустических и упругих волновых полей для сложных геофизических моделей сред для реальных пространственно-временных масштабов. Исследована зависимость точности получаемого решения для различных способов аппроксимации криволинейной границы: Метод скошенных ячеек, гибридный метод, ступенчатая аппроксимация. Показано, что разработанная предобусловливающая процедура как с точки зрения числа операций, так и с точки зрения параллельной аппроксимации одинаково эффективна для всех трех подходов.

**За поведенные исследования, в 2014 году кандидату физико-математических наук Терехову А.В. была присуждена медаль Российской Академии Наук с премией для молодых ученых в области информатики, вычислительной техники и автоматизации за работу «Высокомасштабируемые параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений» (постановление президиума РАН № 25 от 18.02.2014).

1. Предлагаемый подходы, полученные результаты. В проекте поставлена задача разработки параллельного численно-аналитического метода моделирования акустических и упругих волновых полей для моделей сред, включающих переменный рельеф местности и верхнюю часть разреза. Одним из требований к разрабатываемым алгоритмам --- обеспечение высокой автоматизации всего процесса моделирования, что крайне важно при проведении расчетов на суперкомпьютерах.

Для повышения точности расчетов, вместо разностной аппроксимации по времени был рассмотрен алгоритм на основе интегрального преобразования Лагерра[4]:

$$L\{g(t)\} = \bar{g}_m = \int_0^{\infty} g(t) l_m^{\alpha}(\eta t)\left(\eta t\right)^{-\alpha/2} dt, \qquad g(t) = L^{-1}\{\bar{g}_m\} = (\eta t)^{\frac{\alpha}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \bar{g}_m l_m^{\alpha}(\eta t). \qquad (1)$$

Здесь $l_m^{\alpha}(t)$ ортонормированные фукции Лагерра, m - степень многочлена Лагерра, α порядок функции Лагерра, η - параметр преобразования.

Применяя преобразование (1) к уравнению динамической задачи теории упругости

$$
\begin{cases}
\rho(\mathbf{x})\dfrac{\partial^2 \mathbf{U}(\mathbf{x},t)}{\partial t^2} = \mathfrak{L}[\mathbf{U}(\mathbf{x},t)] + \rho(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x})f(t), \quad t>0, \mathbf{x}=(r,z)\in\Omega, \\
\mathbf{U}(\mathbf{x},t)\big|_{t=0} = \dfrac{\partial \mathbf{U}(\mathbf{x},t)}{\partial t}\bigg|_{t=0} = 0, \\
\mathfrak{L}[\mathbf{U}] = (\lambda+\mu)\nabla(\nabla\cdot\mathbf{U}) + \mu\nabla^2\mathbf{U} + \nabla\lambda(\nabla\cdot\mathbf{U}) + \nabla\mu\times(\nabla\times\mathbf{U}) + 2(\nabla\mu\cdot\nabla)\mathbf{U},
\end{cases} \tag{2}
$$

получаем

$$
\mathfrak{L}(\bar{\mathbf{U}}_m) - \rho\frac{\eta^2}{4}\bar{\mathbf{U}}_m = \rho\Phi_2(\bar{\mathbf{U}}_m) - \rho\mathbf{F}L\{f(t)\}, \quad m=0,1,2..... \tag{3}
$$

$$
\Phi_2(\bar{g}_n) \equiv \eta^2\sqrt{\frac{n!}{(n+\alpha)!}}\sum_{k=0}^{n-1}(n-k)\sqrt{\frac{(k+\alpha)!}{k!}}\bar{g}_k.
$$

Новизна состоит в том, что в отличие от преобразования Фурье, после применения преобразования Лагерра необходимо многократно обращать знакоопределенный оператор, который не зависит от номера коэффициента разложения. Такой подход позволяет осуществить переход от начально-краевой задачи к серии краевых задач с одним и тем же оператором вида $\mathfrak{L}-\rho\eta^2/4$ и различными правыми частями. Таким образом, для данного класса спектральных методов одной из основных вычислительных проблем является решение систем линейных алгебраических уравнений вида

$$
A\mathbf{y}_n = \mathbf{f}_n, \; n=1,2,..., \tag{4}
$$

возникающих после пространственной аппроксимации задачи (3). Как было сказано выше, преобразование Лагерра позволяет получить серию краевых задач для знакоопределенных операторов, не зависящих от параметра разделения (для преобразования Фурье—это частота, для Лагерра – порядок многочлена Лагерра). В дальнейшем это важное свойство позволит эффективно применять параллельный алгоритм дихотомии для решения систем линейных алгебраических уравнений[1,2], что обеспечит высокую эффективность расчетов с применением суперкомпьютеров. При этом необходимо также учитывать, что для решения разностных уравнений, аппроксимирующих знакоопределенные операторы, требуется существенно меньшие вычислительные затраты, чем для знаконеопределенных систем. Вычисление коэффициентов разложения ряда Фурье-Лагерра с достаточной точностью обеспечивает устойчивость всего вычислительного процесса.

Вычислительным ядром предлагаемого алгоритма является новая параллельная процедура решения задач (4), разработанная на основе быстрых предобусловливающих алгоритмов и алгебраического метода декомпозиции областей (декомпозиция Шура) рис.1.

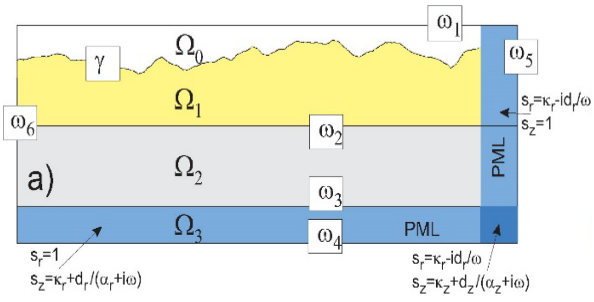

Рисунок 1: *а) Декомпозиция расчетной области на подобласти, для которых используются различные процедуры решения разностных уравнений*

Для этого система (4) записывается в виде:
$$
\begin{bmatrix}
A_{\Omega_1} & 0 & 0 & A_{\Gamma 1} \\
0 & A_{\Omega_2} & 0 & A_{\Gamma 2} \\
0 & 0 & A_{\Omega_3} & A_{\Gamma 3} \\
A_{\Gamma 1}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma 2}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma 2}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma\Gamma}
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix}
\mathbf{x}_{\Omega_1} \\ \mathbf{x}_{\Omega_2} \\ \mathbf{x}_{\Omega_3} \\ \mathbf{x}_{\Gamma}
\end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix}
\mathbf{f}_{\Omega_1} \\ \mathbf{f}_{\Omega_2} \\ \mathbf{f}_{\Omega_3} \\ \mathbf{f}_{\Gamma}
\end{Bmatrix},
$$

затем сначала решается задача для определения значения сеточных функций на границе подобластей:

$$S\mathbf{x}_\Gamma = \mathbf{f}_\Gamma - \sum_{i=1}^{3} A_{\Gamma i}^{\mathrm{T}} A_{\Omega_i}^{-1} \mathbf{f}_{\Omega_i}, \qquad S = A_{\Gamma\Gamma} - \sum_{i=1}^{3} A_{\Gamma i}^{\mathrm{T}} A_{\Omega_i}^{-1} A_{\Gamma i},$$

тогда как значения сеточных функций в подобластях находятся как:

$$\mathbf{x}_{\Omega_i} = A_{\Omega_i}^{-1}\left(\mathbf{f}_{\Omega_i} - A_{\Gamma i}\mathbf{x}_\Gamma\right), \quad \text{for } i = 1, 2, 3.$$

Экономичность по числу арифметических действий процедуры решения этих задач достигается за счет использования быстрого Фурье преобразования и алгоритма дихотомии, в контексте метода разделения переменных для обращения предобусловливающего оператора Δ для решения уравнений с матрицами A_{Ω_i}. Такой подход позволяет эффективно рассчитывать волновые поля для моделей сред, для которых можно выделить макроподобласти с небольшими вариациями скоростей, а также эффективно решать разностные уравнения для рельефа местности и PML граничных условий.

Основная проблема реализации PML граничных условий в рамках численно-аналитического подхода состоит в решении ленточной СЛАУ с шириной ленты порядка ста, где для решения этой задачи применялся алгоритм дихотомии. Для решения разностных уравнений в подобласти Ω_1 используется алгебраический вариант метода фиктивных областей—метод фиктивных компонент.

Для успешной реализации всех предобусловливающих процедур, метода декомпозиции областей и метода фиктивных компонент, в рамках проекта была предложена новая модификация алгоритма дихотомии, позволяющая снизить число операций подготовительного этапа алгоритма дихотомии (предварительного расчета некоторых элементов обратной матрицы) и тем самым значительно увеличить максимально возможное число процессоров.

Вычислительные эксперименты показали, что временные затраты, необходимые для решения PML уравнений, составляют незначительную часть от общего времени счета. Применение преобразования Лагерра по времени вместо разностных аппроксимаций улучшает согласованность PML уравнений. В итоге, величина амплитуды отраженной фиктивной волны была на уровне ошибок аппроксимации волновых уравнений. Как и для метода декомпозиции для решения PML – разностных уравнений использовался модифицированный алгоритм дихотомии для матриц, имеющих выраженное диагональное преобладания.

Необходимость корректного задания граничных условий на криволинейной свободной поверхности предъявляет существенные требования к качеству аппроксимации пространственных производных вблизи границы. В рамках проекта была исследована зависимость точности получаемого решения для различных способов аппроксимации криволинейной границы: Метод скошенных ячеек, гибридный метод, ступенчатая аппроксимация (рис. 2). Оригинальность исследования состоит в том, что метод скошенных ячеек, как правило, не применяется для моделирования волновых полей, так как проявляет неустойчивость. Как показали численные расчеты для моделирования упругих волн сложно построить одновременно устойчивую и достаточно точную аппроксимацию на основе метода скошенных ячеек, однако, для акустических волн такая схема может быть предложена на основе метода конечных объемов и по точности не уступает методу конечных элементов для гибридных сеток.

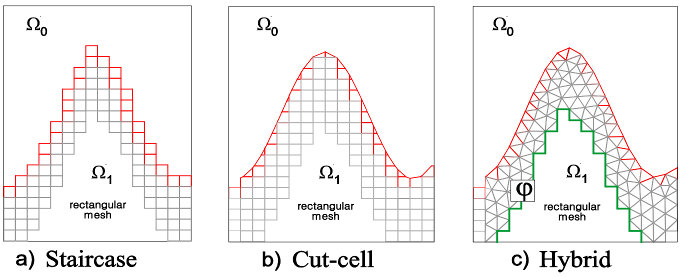

Рис.2: Способы аппроксимации переменного рельефа местности.

2. Результаты вычислительных экспериментов. Сравнивая волновые поля, приведенные на рис.3.a и рис.3.b, отмечаем, что использование ступенчатой аппроксимации приводит к существенному нефизическому рассеиванию акустических волн от криволинейной границы, тогда как применение метода скошенных ячеек или гибридной сетки позволяет исключить этот нежелательный эффект. Несмотря на то, что амплитуда фиктивных отраженных волн значительно меньше, чем амплитуда моделируемой волны, при длительном счете погрешность, обусловленная нефизическим рассеянием, накапливается и приводит к выраженной ошибке амплитуды волны (рис.3.c).

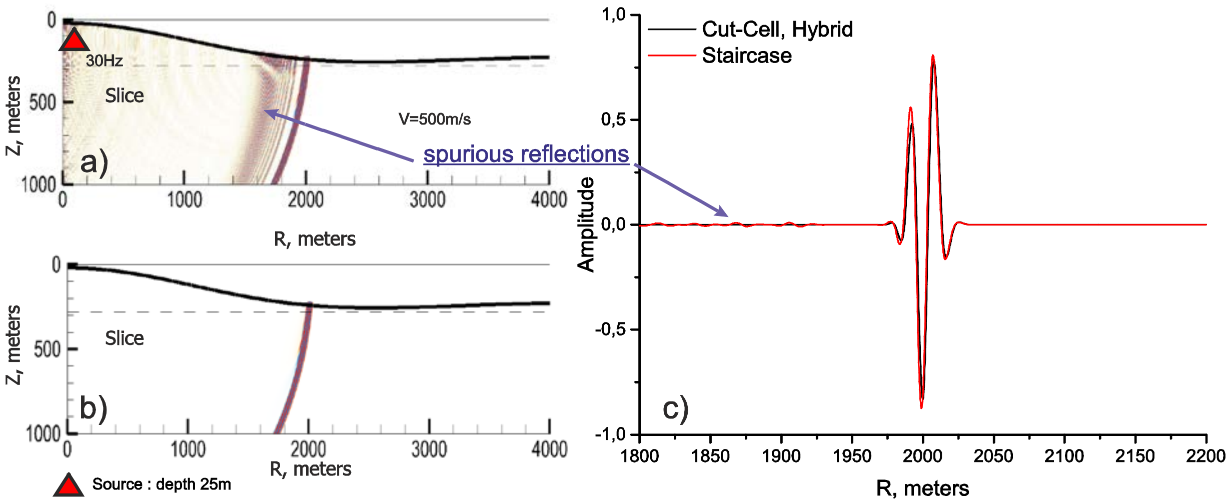

Рисунок 3. *Мгновенный снимок акустического волнового поля в момент времени t=4.25s для (a) ступенчатой (b) гибридной и скошенных ячеек аппроксимации рельефа, (c) зависимость амплитуды вдоль линии "Slice".*

При моделировании динамики упругих волн вычислительные эксперименты с применением различных способов аппроксимации переменного рельефа показали (рис.4), что ступенчатая аппроксимация порождает сильное нефизическое рассеяние для всех типов волн (P, S, Рэлеевских), что для длительных временных интервалов значительно искажает амплитуды волнового поля.

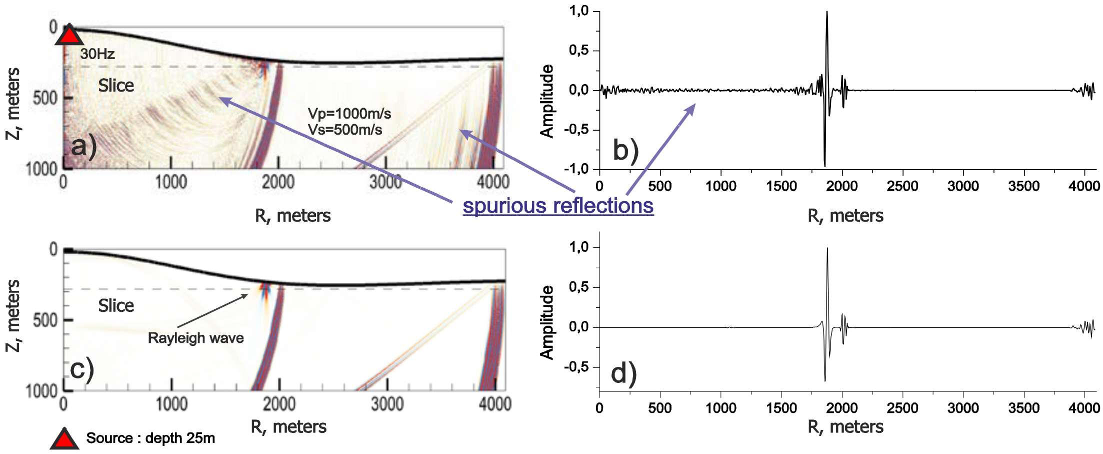

Рисунок 4. Мгновенный снимок волнового поля для компоненты u_r для ступенчатой (a) и гибридной аппроксимации (c) в момент времени t = 4.25s. Зависимость амплитуды от координаты r вдоль прямой "Slice"для ступенчатой(b) и гибридной аппроксимации(d).

Применение метода скошенных ячеек или гибридного метода для аппроксимации рельефа практически исключает эффект численного рассеивания, в том числе и для таких сложных сред как “The Canadian foothills” (рис. 5). Видно (рис.5.c), что минимальное значение числа узлов сетки на длину волны должно быть не менее 100, что обусловлено использованием схем второго порядка точности, а также сложностью модели среды (криволинейная граница, разрывные коэффициенты сред и т.д.).

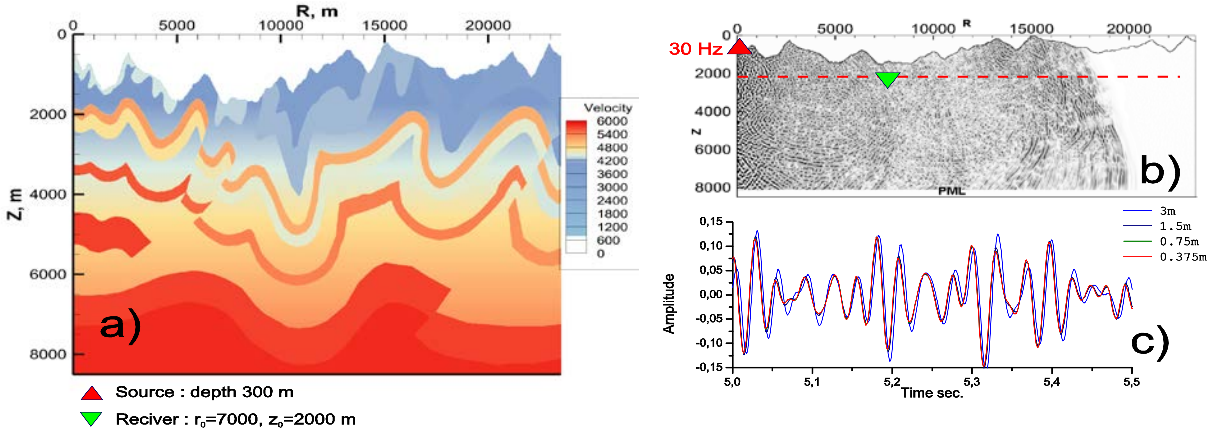

Рисунок 5:(a) Модель среды the Canadian Foothills, (b) мгновенный снимок акустического волнового поля в момент времени, (c) зависимость амплитуды волнового поля для приемника от времени для гибридной сетки различной подробности.

Важно отметить, что метод скошенных ячеек и гибридный способы аппроксимации переменного рельефа при моделировании акустических волновых полей позволяют достичь одинаковой точности расчетов, тогда как для моделирования упругих волновых полей следует использовать метод конечных элементов с применением гибридной сетки. В этом случае механическая энергия сохраняется с высокой степенью точности. Так как предобусловливающая процедура при вычислении коэффициентов ряда Фурье-Лагерра позволяет одинаково быстро решать системы линейных алгебраических уравнений для всех рассмотренных способов аппроксимаций криволинейной границы, поэтому единственное преимущество ступенчатой аппроксимации является более простая программная реализация, что несущественно при выборе метода решения.

Таким образом, в дополнение к уже существующим методам моделирования акустических и сейсмических волновых полей предложен новый инструмент численного моделирования, позволяющий проводить расчеты для моделей сред, включающих переменный рельеф местности и верхнюю часть разреза. Оригинальность предлагаемого подхода состоит в том, что для решения задачи применены хорошо известные и теоретически обоснованные экономичные численные алгоритмы, однако, при этом основные трудности, связанные с решением систем линейных алгебраических уравнений больших размерностей на многопроцессорных вычислительных системах, были решены за счет применения параллельного алгоритма дихотомии, разработанного руководителем проекта. Такой подход позволил решить проблему эффективной реализации спектрально-разностных методов на многопроцессорных вычислительных системах при моделировании сейсмических волновых полей.

Список литературы:

1. Terekhov Andrew. Parallel dichotomy algorithm for solving tridiagonal system of linear equations with multiple right-hand sides. // Parallel Comput. 2010. Vol. 36. N. 8. pp. 423—438.
2. Andrew V. Terekhov, A fast parallel algorithm for solving block-tridiagonal systems of linear equations including the domain decomposition method // Parallel Computing, Vol. 39(6-7), 2013, p.245-258.
3. Alexey G. Fatyanov and Andrew V. Terekhov, High performance acoustic and elastic waves using the parallel dichotomy algorithm// Journal of Computational Physics (2011), Vol. 230. N. 5 pp. 1992—2003, 2010.
4. B.G. Mikhailenko, Spectral Laguerre method for the approximate solution of time dependent problems, Appl. Math. Lett. 12 (1999) 105–110.
5. Andrew V. Terekhov, Spectral-difference parallel algorithm for the seismic forward modeling in the presence of complex topography // Journal of Applied Geophysics, Volume 115, pp. 206-219.
6. Andrew V. Terekhov, A highly scalable parallel algorithm for solving Toeplitz tridiagonal systems of linear equations // Journal of Parallel and Distributed Computing, Volume 87, pp. 102-108.

Публикации, конференции

- Результаты исследования были представлены на конференции: “*Спектрально-разностный алгоритм для моделирования акустических и упругих волновых полей на многопроцессорных вычислительных системах”. //// Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2014, июнь 8-11, 2014, Академгородок, Новосибирск, Россия.*
- Результаты исследования оформлены в виде статьи Andrew V. Terekhov, Spectral-difference parallel algorithm for the seismic forward modeling in the presence of complex topography// Journal of Applied Geophysics, Volume 115, pp. 206-219, doi:10.1016/j.jappgeo.2015.02.016

3. Ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также Ваши предложения по их совершенствованию.

Впечатления положительны. Возникающие проблемы при работе с кластером решаются оперативно.