ТЕХНОЛОГИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН В СРЕДАХ СО СЛОЖНОЙ 3D ГЕОМЕТРИЕЙ ПОВЕРХНОСТИ НА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ КЛАСТЕРАХ

Титов П.А., ИВМиМГ СО РАН

Новосибирск 2018

Введение

Моделирование 3D упругих волн в средах различного строения является важным аспектом создания геофизических 3D моделей, изучения особенностей волновых полей.

Зачастую решить обратную задачу геофизики (восстановление строения и параметров среды по экспериментально полученным записям сигналов) сложно, и одним из методов является решение набора прямых задач (моделирование сейсмополей в среде с заданными параметрами и строением) с варьированием значений параметров и геометрии среды при сравнении реальных данных с результатами моделирования.

Наиболее используемый метод для решения прямой задачи - метод конечных разностей (например, [1, R. Graves; 2, J. Virieaux; 3, D. Apello]).

Исследуемая область может обладать сложной 2D или 3D геометрией поверхности, поэтому важным отличительным моментом работы является построение криволинейной сетки.

Учитывая масштабы области при решении реальных задач (десятки километров в каждом координатном направлении), задача численного моделирования становится не выполнима на персональной рабочей станции.

Поэтому были разработаны параллельные 2D и 3D алгоритмы и их программная реализация для проведения расчетов на высокопроизводительных кластерах.

Расчеты для данной работы проводились на кластерах НКС-30T+GPU (Сибирский Суперкомпьютерный Центр, www2.sscc.ru) и МВС 10П (МСЦ РАН, http://www.jscc.ru).

Также активно применяется идея со-дизайна.

При моделировании упругих волн часто используется разбиение области на прямоугольные ячейки, что приводит к нефизичным эффектам вблизи свободной поверхности.

(Рисунок предоставлен Караваевым Д.А., ИВМиМГ СО РАН)





Построение криволинейной 2D сетки Метод отображений

Физическая область Расчетная область q(x,y), r(x,y)x(q,r), y(q,r)

[4] В. Д. Лисейкин, «Разностные сетки. Теория и приложения» // Новосибирск, издательство СО РАН, 2014. – 254 с.

Криволинейная сетка получается как взаимно-однозначное отображение равномерной сетки прямоугольной области (метод отображений, [4, стр. 12]). Таким образом задачу в исходной области сложной формы можно «перенести» на область простой формы, сделав замену переменных.

Постановка задачи и ее преобразование

$ \begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + F_x = 0 \\ p \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) + F_y = 0 \\ \hline n_x \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) + n_y \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) = 0 \\ n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) \right) + n_y \left((2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + n_y \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\mu (\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + n_y \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + n_y \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + n_y \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_x \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \\ \hline n_$	Уравнения взяты из работы [2]. Явная разностная схема также взята из работы [2], за исключением условий на свободной поверхности, которые предложены автором данной работы.
$\begin{split} J\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial q} \left[Jq_x [(2\mu + \lambda)(q_x \partial_q + r_x \partial_r)u + \lambda(q_y \partial_q + r_y \partial_r)w] \\ & + Jq_y [\mu((q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + (q_y \partial_q + r_y \partial_r)u)]] \\ & + \frac{\partial}{\partial r} \left[Jr_x [(2\mu + \lambda)(q_x \partial_q + r_x \partial_r)u + \lambda(q_y \partial_q + r_y \partial_r)w] \\ & + Jr_y [\mu((q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + (q_y \partial_q + r_y \partial_r)u)]] + F_x = B_1(u, w) + F_x \\ J\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial q} \left[Jq_x [\mu((q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + (q_y \partial_q + r_y \partial_r)w)] \\ & + Jq_y [(2\mu + \lambda)(q_x \partial_q + r_x \partial_r)u + \lambda(q_y \partial_q + r_y \partial_r)w]] \\ & + \frac{\partial}{\partial r} \left[Jr_x [\mu((q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + (q_y \partial_q + r_y \partial_r)w]] \\ & + Jr_y [(2\mu + \lambda)(q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + (q_y \partial_q + r_y \partial_r)w]] \\ & + Jr_y [(2\mu + \lambda)(q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + (q_y \partial_q + r_y \partial_r)w]] \\ & + Jr_y [(2\mu + \lambda)(q_x \partial_q + r_x \partial_r)w + \lambda(q_y \partial_q + r_y \partial_r)w]] + F_y = B_2(u, w) + F_y \end{split}$	Начальные и граничные условия $u _{\partial T} = w _{\partial T} = 0, \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} = 0$
$\begin{split} \dot{r_x}[(2\mu+\lambda)(q_x\partial_q+r_x\partial_r)u+\lambda(q_y\partial_q+r_y\partial_r)w]+\dot{r_y}[\mu((q_x\partial_q+r_x\partial_r)w+(q_y\partial_q+r_y\partial_r)u)] = 0 \\ \dot{r_x}[\mu((q_x\partial_q+r_x\partial_r)w+(q_y\partial_q+r_y\partial_r)u)]+\dot{r_y}[(2\mu+\lambda)(q_x\partial_q+r_x\partial_r)u+\lambda(q_y\partial_q+r_y\partial_r)w] = 0 \end{split} \label{eq:holoss}$	$\frac{r_x}{r_{\text{III}}} = \frac{r_x}{\sqrt{r_x^2 + r_y^2}}, \dot{r_y} = \frac{r_y}{\sqrt{r_x^2 + r_y^2}} \\ q_x = \frac{y_r}{J}, r_x = -\frac{y_q}{J}, q_y = -\frac{x_r}{J}, r_y = \frac{x_q}{J} \end{cases}$

[2] Daniel Apello, N. Anders Petersson «A stable finite difference method for the elastic Wave equation on complex Geometries with free surfaces» // COMMUNICATIONS IN COMPUTATIONAL PHYSICS, January 2009, Vol. 5, No. 1, pp. 84-107.

Пошаговый метод Лагерра

Детальное описание пошагового метода Лагерра – в работе [5]

$$v(au) \approx \sum_{n=0}^{N} v_n l_n(au h)$$

(*) $Av = b$ - система из 2N линейных уравнений
 $(v(au) = (u(au), w(au)), \quad v_n = (u_n, w_n), \quad l_n$ -базисные функции Лагерра)

$$Av = b \longrightarrow v = Cv + b \longrightarrow v^{k+1} = Cv^k + b$$

 $v^{k+1} = Cv^k + b$ - численно решается методом простых итераций [5].

Выбор итеративного метода обусловлен свойствами матрицы A, которые обеспечивают быструю сходимость.

[5] Г.В. Демидов, В.Н. Мартынов «Пошаговый метод решения эволюционных задач с использованием функций Лагерра» // Сибирский журнал вычислительной математики. 2010 Том 13, №4, стр. 413-422

Параллельная реализация на CPU

Одномерная декомпозиция вычислительной области:

Реализация на CPU, 1 MPI-поток – 1 вычислительное ядро



Параллельная реализация на CPU+Phi (offload)

Одномерная декомпозиция вычислительной области.

Реализация на CPU + Phi, 1 MPI-поток – 1 вычислительное ядро + 1 Phi (60 ядер, 240 потоков)



Параллельная реализация на Phi (PetaStream)

Одномерная декомпозиция вычислительной области.

Реализация на CPU + Phi, 1 MPI-поток – 1 Phi (60 ядер, 240 потоков)



Особенности распараллеливания алгоритмов

Явная схема: обмены между соседними процессами после каждого временного шага.

Пошаговый метод Лагерра: поскольку для решения системы линейных уравнений используется метод простых итераций, то можно «прореживать» обмены между процессами, поскольку это не влияет на сам факт сходимости, а только на ее скорость.

По времени выгодней сделать большее число итераций и меньшее число обменов.

$$v_{i,j}^{k+1} = f(v_{i-1,j}^k, v_{i+1,j}^k, v_{i,j-1}^k, v_{i,j+1}^k, \dots, v_{i-1,j-1}^k)$$
Обмены после каждой итерации

 $v_{i,j}^{k+1} = f(v_{i-1,j}^k, v_{i+1,j}^k, v_{i,j-1}^k, v_{i,j+1}^{k-3}, \dots, v_{i-1,j+1}^{k-3})$ Обмены раз в 4 итерации

Таким образом, делая вдвое больше итераций и вдвое меньше пересылок, на тестовой модели было получено ускорение работы программы на **40-50%**.

Математическая модель



Параметры среды : $\rho = 1$, $\lambda = 0.5$, $\mu = 0.25$. На (рис. 7) размеры области - в километрах. Соответствующая ей «расчетная» область – прямоугольник размером 64х32 км, дискретизация области – 5120х2060 ячеек. Источник - типа «центр давления», работает в течение 2-х секунд. В уравнениях он представлен двумя компонентами (F_x , F_y).

$$F_{x} = \begin{cases} \frac{\partial \delta(x - x_{0}, y - y_{0})}{\partial x} (\sin(\pi(t - 1)) + 0.8\sin(2\pi(t - 1)) + 0.2\sin(3\pi(t - 1)))), & 0 \le t \le 2\\ 0, & t \ge 2 \end{cases}$$

$$F_{y} = \begin{cases} \frac{\partial \delta(x - x_{0}, y - y_{0})}{\partial y} (\sin(\pi(t - 1)) + 0.8\sin(2\pi(t - 1)) + 0.2\sin(3\pi(t - 1)))), & 0 \le t \le 2\\ 0, & t \ge 2 \end{cases}$$

$$0, & t \ge 2 \end{cases}$$

$$12$$

Вычислительные ресурсы

HKC-30T+GPU (сервер G6):

64 двойных блейд-сервера

HP BL2x220 G6: 128 вычислительных

модулей, RAM модуля - 16 Гбайт, 256 (1024 ядра) процессоров Intel Xeon E5540

www2.sscc.ru



MBC-10П (RSC Tornado):

207 модуля по 2 процессора Xeon E5-2690 и 2 сопроцессора Intel Xeon Phi 7110X, RAM модуля — 64 Гбайта.

www.jscc.ru



MBC-10Π MΠ (RSC PetaStream):

8 модулей по 8 сопроцессоров Xeon Xeon Phi 7120D (60 ядер, 240 потоков), RAM 16 Gb DDR5. Твердотельные накопители Intel SSD DC S3500.

www.rscgroup.ru



Сравнительные тесты (пошаговый метод Лагерра)





Результаты расчетов Простая сетка



Простейший способ трансфинитной интерполяции [4, стр. 53]. На увеличении видно хорошую согласованность между сеткой и физической областью. С применением данной сетки было проведено 2 расчета: с использованием явной разностной схемы по пространству и времени, а также с использованием пошагового метода Лагерра по времени и конечных разностей по пространству.

Результаты расчетов Простая сетка

Явная схема



Результаты расчетов Простая сетка

Пошаговый метод Лагерра



Результаты расчетов Локально-ортогональная сетка

Локально-ортогональная сетка. Трансфинитная интерполяция [4, стр.54] Ключевой момент – ортогональность возле свободной поверхности координатных линей первого и второго семейств (**q** и **r**). С применением данной сетки было проведено 2 расчета: с использованием явной разностной схемы по пространству и времени, а также с использованием пошагового метода Лагерра по времени и конечных разностей по пространству.



Результаты расчетов Локально-ортогональная сетка

Явная схема



Результаты расчетов Локально-ортогональная сетка

Пошаговый метод Лагерра





Построение криволинейной 3D сетки Метод отображений

Криволинейная сетка получается как взаимно-однозначное Расчетная область отображение равномерной сетки прямоугольной области (метод отображений, [4, стр. 12, В. Д. Лисейкин]). Таким образом задачу в исходной области сложной формы можно «перенести» на область простой формы, сделав замену переменных.

Пример для 3D области:

Физическая область



Постановка задачи и ее преобразование

В декартовой системе координат в переменных (x, y, z) уравнения имеют вид: $\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + F_x \\
\rho \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + F_y \\
\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial w}{\partial z} \right) + F_z$

где F_x, F_y, F_z – компоненты массовой силы.

Граничные условия и начальные нулевые условия имеют вид :

$$u|_{\partial\Gamma} = v|_{\partial\Gamma} = w|_{\partial\Gamma} = 0, \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial w}{\partial t} = 0$$

Условия на свободной поверхности ∂S :

$$\begin{split} n_x \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) + n_y \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + n_z \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) &= 0 \\ n_x \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + n_y \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) + n_z \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) &= 0 \\ n_x \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + n_y \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + n_z \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial w}{\partial z} \right) &= 0 \end{split}$$

Задача является динамической. Ее решение связано с решением системы уравнений теории упругости в 3D случае, записанной в смещениях (U,V,W). В данной работе рассматриваются упругие волны для случая изотропной среды. Свойства среды определяются тремя параметрами: коэффициентами Ламэ λ, μ и плотностью ρ.

$$x = x(q1, q2, q3)$$

$$y = y(q1, q2, q3)$$

$$z = z(q1, q2, q3)$$

$$\begin{split} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q^j} \left((\lambda + 2\mu) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial q^i} + \lambda \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial q^i} + \lambda \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) \\ &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial y} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial q^i} + \mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial q^i} \right) + \\ &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial z} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial q^i} + \mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) + F_x \end{split}$$
+

$$\begin{split} \rho \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial q^i} + \mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial q^i} \right) + \\ &\sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial y} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\lambda \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial q^i} + (\lambda + 2\mu) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial q^i} + \lambda \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) + \\ &\sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial z} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial q^i} + \mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) + F_y \end{split}$$

$$\begin{split} \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial q^i} + \mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) + \\ & \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial y} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial q^i} + \mu \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) + \\ & \sum_{j=1}^3 \frac{\partial q^j}{\partial y} \frac{\partial}{\partial q^j} \left(\lambda \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial q^i} + \lambda \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial q^i} + (\lambda + 2\mu) \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q^i}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial q^i} \right) + F_z \end{split}$$

x = x(q1, q2, q3) y = y(q1, q2, q3)z = z(q1, q2, q3)

Основные уравнения

Разностная схема для численных расчетов

Для уравнений строится разностный аналог. За основу берутся формулы из работы [3, D. Apello], адаптированные для 3D-случая. Фактически, все дифференциальные операторы заменяются на разностные аналоги (центральные разности). Для реализации условий на свободной поверхности задействуются «фиктивные» узлы.

Условие устойчивости схемы получено автором данной работы, аналогично работе [2, J. Virieaux].

Схема обеспечивает второй порядок аппроксимации по времени и по пространству.



V_p∆t≤ min J h / J - Условие устойчивости разностной схемы, где Vp — скорость продольных лов мали волн, J — значение якобиана преобразования, h — дискретный шаг расчетной маг сетки (одинаков по всем координатным направлениям).

Параллельная реализация



Для проведения расчетов была создана параллельная версия программы при помощи языка Fortran и пакета MPI.

Обмен данными между соседними процессами осуществляется через заданную 3D-топологию куб посредством неблокирующих пересылок MPI_Isend, MPI_Irecv.



Для каждого куба (белым) Добавлены «слои перекрытия» (серым) для организации обменов данными между соседними процессами. Всего 20 разнонаправленных пересылок.



Вычисления внутри каждого отдельного куба разбиты на 2 части: граница куба и внутренняя часть куба (на рисунке – белым и серым цветом соответственно). Схематично работа программы для каждого блока выглядит следующим образом:

0) Построение криволинейной сетки и вычисление всех постоянных коэффициентов для задачи (обмены между блоками отсутствуют);



- Запуск неблокирующих пересылок MPI_Isend, MPI_Irecv;
- 3) Вычисления внутри блока (пока идут пересылки);
- Проверка завершения пересылок MPI_Waitall;
- **(5)** Переход к **1)**.

Вычислительные ресурсы

HKC-30T+GPU (сервер G6):

64 двойных блейд-сервера

HP BL2x220 G6: 128 вычислительных

модулей, RAM модуля - 16 Гбайт, 256 (1024 ядра) процессоров Intel Xeon E5540

www2.sscc.ru



Тест на ускорение. Область 480х480х480 точек. 1000 итераций по времени (сервер G6)



Тест на масштабируемость. Область 240x240x240 точек. 1000 итераций по времени (сервер G6)



31

Тестовая модель



Модель: область 18x18x14 км. 900x900x600 ячеек. λ= 0,5 кг·м/c² μ= 0,25 кг·м/c² Плотность среды – 1000 кг/м³.



Для построения сетки применяется метод трансфинитной интерполяции ([4, стр. 53, В. Д. Лисейкин]). Сетка является локально-<u>ортогональной</u> возле свободной поверхности. Это позволяет увеличить точность реализации граничных условий и проводить моделирование для областей со значительной кривизной поверхности.



2D:

-Представлено 2 параллельных алгоритма: на основе явной разностной схемы, а также на основе пошагового метода Лагерра по времени

-Для каждого алгоритма рассмотрено 2 способа построения криволинейной сетки

-Показано, что алгоритмы с использованием локально-ортогональной криволинейной сетки позволяют избавиться от дифракционных волн при численном моделировании

-Проведены сравнительные тесты ускорений на разных архитектурах для алгоритма на основе пошагового метода Лагерра по времени

3D:

- Представлен параллельный алгоритм моделирования упругих волн в средах со сложной 3D топологией поверхности.
- Показан способ построения криволинейной 3D сетки.

- Проведены тестовые расчеты на многопроцессорной архитектуре, представлены результаты численного моделирования.

Автор выражает благодарность Мартынову В. Н. за консультации в ходе выполнения работы, а также ССКЦ СО РАН и МСЦ РАН за предоставленное оборудование для численных расчетов.

Литература

1. R.W. Graves Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered grid finite differences. // Bull. Seism. soc. Am., vol.86, pp. 1091-1106, 1996

2. Virieux J. P-SV wave propagation in heterogeneous media: Velocity-stress finite-difference

method. // Geophysics, Volume 51, Number 4, pp. 889–901 (1986)

3. Daniel Apello, N. Anders Petersson «A stable finite difference method for the elastic Wave equation on complex Geometries with free surfaces» // COMMUNICATIONS IN COMPUTATIONAL PHYSICS, January 2009, Vol. 5, No. 1, pp. 84-107.

4. В. Д. Лисейкин, «Разностные сетки. Теория и приложения» // Новосибирск, издательство СО РАН, 2014. – 254 с.

5. Г.В. Демидов, В.Н. Мартынов «Пошаговый метод решения эволюционных задач с использованием функций Лагерра» // Сибирский журнал вычислительной математики. 2010 Том 13, №4, стр. 413-422

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ