Использование технологий параллельного программирования для моделирования сейсмических волн с учетом топографии сеточно-характеристическим методом*

А.М. Иванов[1], Н.И. Хохлов[1, 2]

Московский физико-технический институт[1], ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН[2]

В работе описывается применение ряда технологий параллельного программирования для моделирования распространения динамических волновых возмущений в упругих средах вблизи поверхности с учетом ее топографии. Учет топографии производится путем выполнения расчета на структурированных криволинейных сетках. Численно решается уравнение линейной теории упругости сеточно-характеристическим методом. Расчеты выполнены на центральных процессорах с использованием технологий OpenMP, MPI, а также на графических процессорах при помощи CUDA и OpenCL. Была определена эффективность распараллеливания и производительность вычислений вследствие использования данных технологий. Показана возможность и эффективность применения различных технологий для такого рода задач.

Ключевые слова: OpenMP, MPI, CUDA, OpenCL, сейсмика, топография, сеточно-характеристический метод

1. Введение

С ростом вычилительных мощностей компьютеров и развитием технологий написания параллельных программ, в индустрии возрос интерес к проведению численных расчетов с использованием высокопроизводительных вычислений. Задачи распространения динамических волновых возмущений в гетерогенных геологических средах представляют интерес при проведении геологоразведочных работ. Одна из областей интереса в задачах сейсмики и геофизики – расчет прямой задачи распространения упругих волн. В некоторых постановках такого рода задач необходим учет поверхностной топографии при выполнении численного моделирования.

Целью данной работы является исследование возможности применения технологий параллельного программирования и исследование эффективности их использования при расчете задач распространения динамических волновых возмущений в вблизи земной поверхности. В таких случаях требуется учитывать топографию дневной поверхности для получения более точных результатов расчета. Состояние среды в данной задаче описывается уравнениями механики твердого деформируемого тела, численное решение находится сеточно-характеристическим методом с применением метода покоординатного расщепения.

Существуют подходы, позволяющие примененять различные численные методы для моделирования упругих волн вблизи поверхности. Так в работе [1] рассматривается применение спектрального метода Чебышева для уравнения упругости в формулировке со скоростями и напряжениями. В работе [2] используется конечно-разностный метод восьмого порядка на сдвинутых сетках для моделирования трехмерного случая распространения волн с учетом топографии.

Поскольку проведение расчетов такого рода требует больших затрат времени на современных вычислительных устройствах, для их проведения задействуются технологии параллельного программирования. В последнее время большую популярность получили

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-29-15097 офи_м.

параллельные вычисления на графических процессорах [3].

Применение технологии CUDA для решения уравнения упругости для анизотропного случая описано в работе [4]. Там же рассматривается программная реализация обмена памятью между графическими процессорами напрямую, в обход центрального, для экономии времени. В статье [5] рассматривается решение уравнения акустики для моделирования распространения волн и для обратной миграции с помощью технологии CUDA на кластере GPU. Опыт применения технологии OpenCL для расчетов на графических процессорах приведен в работе [6]. В ней рассматривается двумерное уравнение упругости для анизотропных материалов, решение находится конечно-разностным методом. В перечисленных работах удается получить ускорения по сравнению с CPU версией в десятки раз.

Также активно применяются более традиционные средства параллельного программирования для систем с общей и распределенной памятью. В работе [7] описано применение технологии OpenMP для моделирования сейсмических волн в вязкоупругих приповерхностных средах в двумерном случае. Трехмерный случай упругой и вязкоупругой среды моделируется в статье [8] с использованием MPI.

Кроме этого существуют статьи, в которых рассматривается применение комбинаций из указанных технологий. Например, в работе [9] используется конечно-элементный метод для с распараллеливанием на MPI и CUDA для моделирования сейсмических волн.

В данной работе рассматривается возможность применения сеточно-характеристического метода [13] для решения такого рода задач. Ранее авторами была представлена реализация данного метода на прямоугольных сетках [10] без учета топографии. В ней рассматривается применение сеточно-характеристического метода для решения уравнения линейной теории упругости. Этот метод широко применяется для численного решения гиперболических систем уравнений в частных производных. Более подробно применение сеточно-характеристического метода к задачам сейсмики описано в работах [12, 13].

2. Математическая модель и численный метод

Рассматривается модель изотропного линейно упругого материала. Такая аппроксимация более общей нелинейной модели применяется для численного моделирования задач распространения динамических волновых возмущений в задачах сейсморазведки.

Согласно этой модели состояние упругой среды описывается следующей системой уравнений [14, 15]:

$$\rho \dot{\upsilon} = \nabla \cdot T \ , \tag{1}$$

$$\dot{T} = \lambda \left(\nabla \cdot \upsilon \right) I + \mu \left(\nabla \otimes \upsilon + \upsilon \otimes \nabla \right) \ , \tag{2}$$

где $T = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{yz}, \sigma_{xz}, \sigma_{xy})$ – тензор упругости, I – единичный тензор, $\upsilon = (\upsilon_x, \upsilon_y, \upsilon_z)$ – вектор скорости, ρ – плотность, λ и μ коэффициенты Ламе. Здесь (1) – уравнение движения, а (2) – закон Гука.

Введем переменную $u = (\upsilon_x, \upsilon_y, \upsilon_z, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz})^T$, тогда сможем переписать систему (1), (2) следующим образом:

$$\dot{u} = Au_x + Bu_y + Cu_z, \tag{3}$$

где A, B и C – матрицы, явный вид которых выписан в [15].

Далее для решения получившейся системы применяется метод расщепления по пространственным координатам [16]. Он заключается в последовательном независимом решении трех уравнений:

$$\dot{u} = Au_x, \tag{4}$$

$$\dot{u} = Bu_y, \tag{5}$$

$$\dot{u} = Cu_z. \tag{6}$$

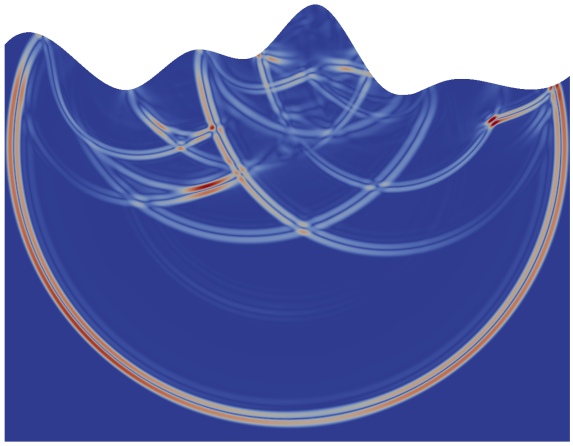

Рис. 1. Волновая картина, расчет на криволинейной сетке, отображен модуль скорости

В результате приходим к необходимости решения трех гиперболических уравнений. Если рассмотреть первое из них, то в результате гиперболического характера уравнения, матрица A может быть представлена в следующей форме:

$$A = \Omega^{-1}\Lambda\Omega, \tag{7}$$

где Ω матрица, составленная из собственных векторов матрицы A, а $\Lambda = diag(s_1, ..., s_n)$ – диагональная матрица, составленная из собственных значений A.

Далее вводится так называемый инвариант Римана $\omega = \Omega u$. что позволяет переписать уравнение в виде:

$$\dot{\omega} = \Lambda\omega. \tag{8}$$

В данной форме уравнение (4), ввиду диагональности Λ, может быть представлено в виде пяти независимых уравнений переноса и может решаться сеточно-характеристическим методом. После этого вычисляется значение на следующем шаге $u = \Omega^{-1}\omega$.

3. Численный эксперимент

В качестве примера моделирования сейсмических волн вблизи поверхности с учетом топографии, рассматривается синтетическая двумерная задача со случайным образом сгенерированной криволинейной границей раздела земли и воздуха. Расчетная область имеет размеры 800 $\times$ 500 узлов. Было задано изначальное возмущение на глубине 50 м от поверхности земли. Волновая картина (Рис. 1) получена в момент времени через 750 мс после возникновения начального возмущения. Была задана однородная среда с параметрами скоростей S- и P-волн $c_p = 2500$ м/с, $c_s = 1500$ м/с соответственно. Плотность среды: $\rho = 1500$ г/см^3. Волновая картина показывает сложную структуру волнового отклика от дневной поверхности.

Тестовые расчеты производились на задачах подобного рода, но при этом бралось большее число узлов сетки и количество шагов по времени. Целью проведения тестовых расчетов было получение значений ускорения и эффекивности распараллеливания.

4. Программная реализация

Для решения указанных задач был написан программный комплекс, где в основном все вычисления производятся с четвертым порядком точности по пространству. Реализован как двумерный, так и трехмерный случай уравнения упругости.

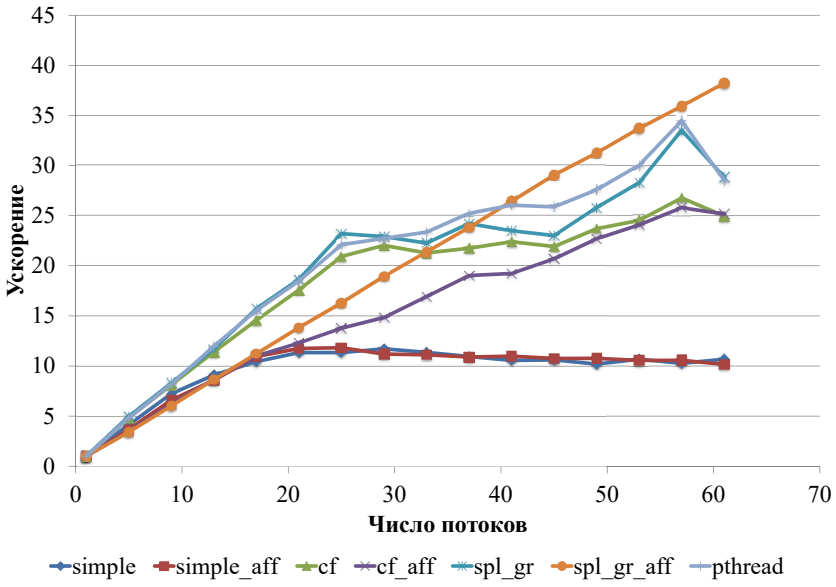

Рис. 2. Ускорение в зависимости от числа потоков (OpenMP)

Работа программного комплекса разделена на два этапа: ввод параметров задачи из конфигурационного файла основной цикл интегрирования по времени. В качестве параметров задается используемый решатель, размерность задачи (2D, 3D), используемое число узлов, размер и количество шагов по времени, граничные условия. Отдельно задаются параметры сетки: декартова, криволинейная, координаты ее узлов, распределение параметров материала среды (плотность, скорости P- и S-волн).

В данном программном комплексе имеется возможность расчета неоднородных сред с различными параметрами материалов. Кроме этого сеточно-характеристический метод реализован на структурированных сетках. Это позволяет производить моделирование распространения волн в объемах с более сложной геометрией. В том числе и с учетом поверхностной топографии.

Программный комплекс распараллелен с использованием различных технологий. Во всех случаях распараллеливания использовался метод геометрического параллелизма, сетка разбивалась на блоки равного размера и каждый блок отдавался на вычисление отдельному потоку. Между шагами по времени происходила синхронизация между потоками: обмен смежными участками сетки на границах блоков.

При распараллеливании в средах с общей памятью использовались OpenMP и POSIX Threads. В процессе разработки были применены различные оптимизации (Рис. 2). Замеры производительности осуществлены на 64-х ядрах, машина с процессором AMD Opteron 6272. Использовались размеры сетки 4000×4000, выполнялось 100 шагов по времени.

Первоначально была реализована простейшая параллельная версия на OpenMP (обозначение – simple), в которой циклы по пространству были распараллелены с использованием директивы #pramga omp parallel.

После этого была произведена оптимизирована для эффективного использования кэш памяти (обозначение – cf). Каждый шаг по времени состоял из последовательно шагов по каждой координате (4), (5), (6). Оптимизация состояла в изменении порядка обхода сетки в шагах по Y и Z так, чтобы обращение к памяти происходило последовательно.

Для улучшения производительности в NUMA системах каждый поток самостоятельно выделял память для участка сетки из своей области ответственности (spl_gr). Согласно стандарту OpenMP [17] это дает указание выделять участок сетки в локальной памяти каждого потока.

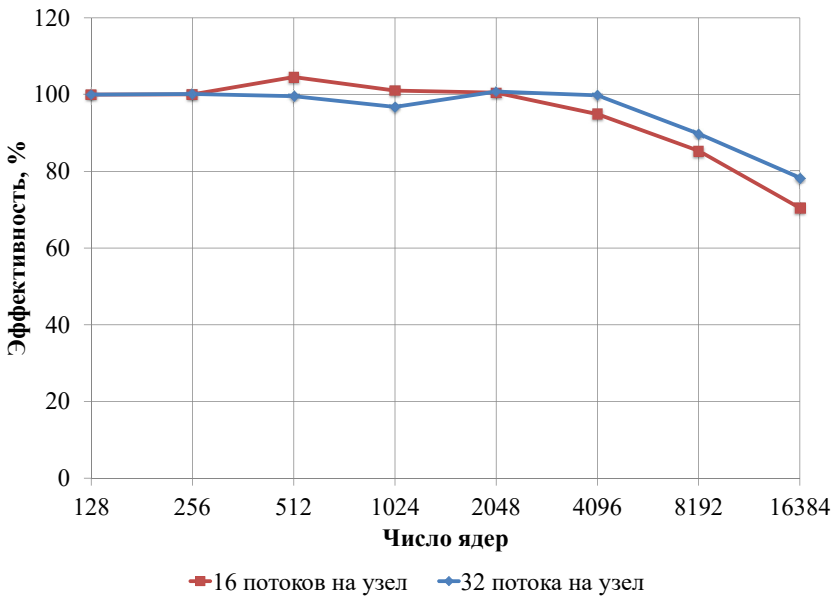

Рис. 3. Эффективность распараллеливания в зависимости от числа ядер (MPI)

Также была использована привязка потоков на все время выполнения расчета к определенным ядрам процессора с помощью параметра OpenMP affinity (обозначение *_aff).

Дополнительно рассматривалась реализация на POSIX Threads (pthread). В конечном итоге в программном комплексе был реализован наиболее оптимизированный вариант (spl_gr_aff) – с разделенной сеткой между потоками, применением оптимизации кэш-памяти и включенным параметром привязки потоков к ядрам CPU.

Также реализовано распараллеливание с использованием технологии MPI. Обмен организован используя функции MPI Isend/Irecv. На Рис. 3 представлен график эффективности распараллеливания на кластере HECToR из 2816 вычислительных узлов, на каждом из которых по 2 процессора AMD Opteron 2.3GHz Interlagos с 16 ядрами. В тесте использовалась расчетная сетка размером $1000 \times 1000 \times 1000$ узлов. Время расчета на 128 ядрах составляло порядка 4 часов.

Немонотонность эффективности распараллеливания для 16 потоков и 32 потоков на узел объясняется архитектурными особенностями данного кластера. Вероятно при использовании 32 потоков на узел, производительность упирается в пропускную способность шины памяти либо в ресурсы FPU. Поэтому и наблюдается падение производительности при числе ядер больше 2048.

Графики ускорения на графических процессорах с использованием CUDA и OpenCL приведены на Рис. 4. Также использовался метод геометрического параллелизма. Для тестовых расчетов бралась сетка из 4096×4096 узлов и 6500 шаов по времени. Для достижения наибольшей производительности использовалась общая (shared) память графического процессора, а также при использовании CUDA, обмен узлами сетки производился между GPU минуя центральный процессор.

5. Заключение

Было продемонстрировано использование технологий параллельного программирования для решения задачи распространения сейсмических волн в линейно упругих средах. Кроме повышения скорости расчетов применен ряд оптимизаций. Таким образом удалось эффективно решить задачу распространения волн упругости в приповерхностных средах, когда важно учитывать топографию.

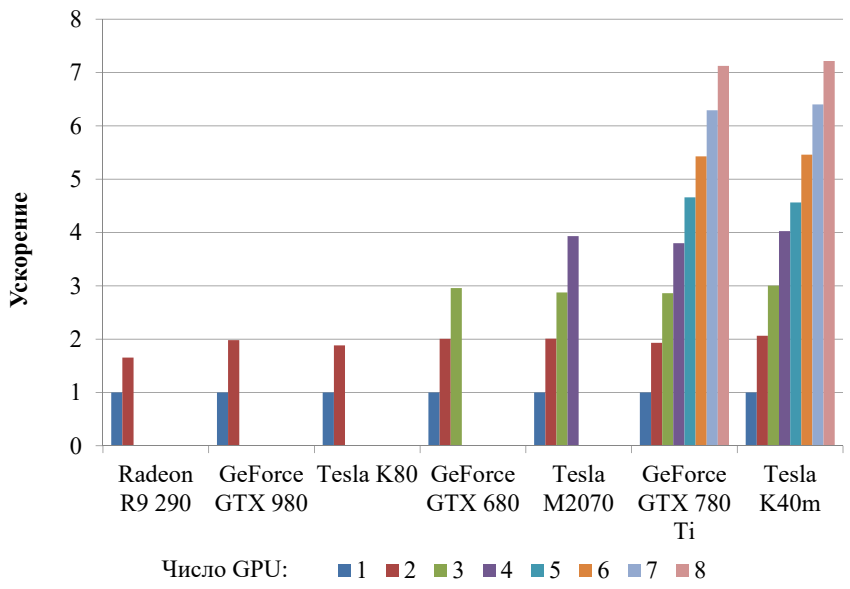

Рис. 4. Ускорение в зависимости от числа используемых GPU

В случае задач, требующих больших объемов памяти для расчета, использование составляющей программного комплекса для расчетов на GPU или расчетов на системах с общей памятью затруднено. Такие задачи рашаются с MPI реализацией предложенного метода. В случае же менее масштабных задач, вычисления на GPU позволяют получать высокие показатели производительности и ускорения.

Приемущество технологии OpenCL перед CUDA состоит в возможности написания одного кода для ряда устройств различных производителей, однако рекомендации по распараллеливанию на OpenCL для GPU различных производителей незначительно отличаются. Кроме этого, из-за обобщенности стандарта некоторые функции OpenCL не так эффективны, как, например, в реализации CUDA. В рассматриваемых задачах обе технологии давют практически одинаковые результаты ускорения и производительности.

Использование POSIX Threads вместо технологии OpenMP для рассматриваемого класса задач не дает значительных приемуществ в ускорении, но реализация решателя с применением OpenMP оказывается намного проще.

Расчеты на декартовых сетках без учета топографии могут давать недостаточно точные результаты. Как показали тестовые расчеты, поставленную выше задачу затруднительно решать как конечно-разностным, так и сеточно характеристическим методом при использовании декартовых сеток путем специального задания параметров скоростей и плотностей, так как, полученный результат может расходиться. Было продемонстрировано, что сеточно-характеристический метод на структурированных сетках так же эффективно поддается распараллеливанию, как и на декартовых сетках, но при этом позволяет решать задачи, в которых расчетная область требует задания сетки с определенной геометрией.

В результате проведения тестовых расчетов были получены результаты эффективности распараллеливания около 60% при использовании технологии OpenMP в системах с общей памятью. В системах с распределенной памятью (MPI) было получено ускорение около 70% (в 90 раз на 128 ядрах), а на графических процессорах – около 85%.

Данная работа была выполнена с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов федерального центра коллективного пользования НИЦ «Курчатовский институт», http://computing.kiae.ru/.

Литература

1. Tessmer E., Kosloff D. 3-D elastic modeling with surface topography by a Chebychev spectral method //Geophysics. – 1994. – V. 59. – N. 3. – P. 464-473. DOI: 10.1190/1.1443608.

2. Hestholm S., Ruud B. 3-D finite-difference elastic wave modeling including surface topography //Geophysics. – 1998. – V. 63. – N. 2. – P. 613-622. DOI: 10.1190/1.1444360.

3. Nakata N., Tsuji T., Matsuoka T. Acceleration of computation speed for elastic wave simulation using a Graphic Processing Unit //Exploration Geophysics. – 2011. – V. 42. – N. 1. – P. 98-104. DOI: 10.1071/EG10039.

4. Weiss R. M., Shragge J. Solving 3D anisotropic elastic wave equations on parallel GPU devices //Geophysics. – 2013. – V. 78. – N. 2. – P. F7-F15. 10.1190/geo2012-0063.1.

5. Abdelkhalek R. et al. Fast seismic modeling and reverse time migration on a GPU cluster //High Performance Computing & Simulation, 2009. HPCS'09. International Conference on. – IEEE, 2009. – P. 36-43. DOI: 10.1109/HPCSIM.2009.5192786.

6. Molero M., Iturrarán-Viveros U. Accelerating numerical modeling of wave propagation through 2-D anisotropic materials using OpenCL //Ultrasonics. – 2013. – V. 53. – N. 3. – P. 815-822. DOI: 10.1016/j.ultras.2012.11.014.

7. Caserta A., Ruggiero V., Lanucara P. Numerical modelling of dynamical interaction between seismic radiation and near-surface geological structures: a parallel approach //Computers & geosciences. – 2002. – V. 28. – N. 9. – P. 1069-1077. DOI: 10.1016/S0098-3004(02)00024-9.

8. Bohlen T. Parallel 3-D viscoelastic finite difference seismic modelling //Computers & Geosciences. – 2002. – V. 28. – N. 8. – P. 887-899. DOI: 10.1016/S0098-3004(02)00006-7.

9. Komatitsch D. et al. High-order finite-element seismic wave propagation modeling with MPI on a large GPU cluster //Journal of computational physics. – 2010. – V. 229. – N. 20. – P. 7692-7714. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.06.024.

10. Khokhlov N. et al. Applying OpenCL Technology for Modelling Seismic Processes Using Grid-Characteristic Methods //International Conference on Distributed Computer and Communication Networks. – Springer, Cham, 2016. – P. 577-588. DOI: 10.1007/978-3-319-51917-3_49.

11. Beklemysheva K. A., Petrov I. B., Favorskaya A. V. Numerical simulation of processes in solid deformable media in the presence of dynamic contacts using the grid-characteristic method //Mathematical Models and Computer Simulations. – 2014. – V. 6. – N. 3. – P. 294-304. DOI: 10.1134/S207004821403003X.

12. Petrov I. B. et al. Grid-characteristic method using high-order interpolation on tetrahedral hierarchical meshes with a multiple time step //Mathematical Models and Computer Simulations. – 2013. – V. 5. – N. 5. – P. 409-415. DOI: 10.1134/S2070048213050104.

13. Golubev V. I., Petrov I. B., Khokhlov N. I. Numerical simulation of seismic activity by the grid-characteristic method //Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2013. – V. 53. – N. 10. – P. 1523-1533. DOI: 10.1134/S0965542513100060.

14. Moczo P., Kristek J., Gális M. The finite-difference modelling of earthquake motions: Waves and ruptures. – Cambridge University Press, 2014.

15. LeVeque R. J. Finite volume methods for hyperbolic problems. – Cambridge university press, 2002. – V. 31.

16. Nakamura T. et al. Exactly conservative semi-Lagrangian scheme for multi-dimensional hyperbolic equations with directional splitting technique //Journal of computational physics. – 2001. – V. 174. – N. 1. – P. 171-207. DOI: 10.1006/jcph.2001.6888.

17. Dagum L., Menon R. OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming //IEEE computational science and engineering. – 1998. – V. 5. – N. 1. – P. 46-55. DOI: 10.1109/99.660313.

Application of parallel programming technologies to seismic modeling with topography using grid-characteristic method

A.M. Ivanov[1], N.I. Khokhlov[1,2]

Moscow Institute of Physics and Technology[1],
Scientific Research Institute of System Analysis[2]

The paper describes the application of a number of parallel programming technologies for modeling waves in elastic media near the surface, taking into account its topography. We consider topography by performing calculations on structured grids. The equation of the linear theory of elasticity is solved numerically by the grid-characteristic method. The calculations were performed on central processors using OpenMP and MPI technologies. In addition, to parallelize implementation on graphics processors we used CUDA and OpenCL. The efficiency of parallelization and the performance of calculations due to the use of these technologies were determined.

Keywords: OpenMP, MPI, CUDA, OpenCL, seismic, topography, grid-characteristic

References

1. Tessmer E., Kosloff D. 3-D elastic modeling with surface topography by a Chebychev spectral method //Geophysics. – 1994. – V. 59. – N. 3. – P. 464-473. DOI: 10.1190/1.1443608.

2. Hestholm S., Ruud B. 3-D finite-difference elastic wave modeling including surface topography //Geophysics. – 1998. – V. 63. – N. 2. – P. 613-622. DOI: 10.1190/1.1444360.

3. Nakata N., Tsuji T., Matsuoka T. Acceleration of computation speed for elastic wave simulation using a Graphic Processing Unit //Exploration Geophysics. – 2011. – V. 42. – N. 1. – P. 98-104. DOI: 10.1071/EG10039.

4. Weiss R. M., Shragge J. Solving 3D anisotropic elastic wave equations on parallel GPU devices //Geophysics. – 2013. – V. 78. – N. 2. – P. F7-F15. 10.1190/geo2012-0063.1.

5. Abdelkhalek R. et al. Fast seismic modeling and reverse time migration on a GPU cluster //High Performance Computing & Simulation, 2009. HPCS'09. International Conference on. – IEEE, 2009. – P. 36-43. DOI: 10.1109/HPCSIM.2009.5192786.

6. Molero M., Iturrarán-Viveros U. Accelerating numerical modeling of wave propagation through 2-D anisotropic materials using OpenCL //Ultrasonics. – 2013. – V. 53. – N. 3. – P. 815-822. DOI: 10.1016/j.ultras.2012.11.014.

7. Caserta A., Ruggiero V., Lanucara P. Numerical modelling of dynamical interaction between seismic radiation and near-surface geological structures: a parallel approach //Computers & geosciences. – 2002. – V. 28. – N. 9. – P. 1069-1077. DOI: 10.1016/S0098-3004(02)00024-9.

8. Bohlen T. Parallel 3-D viscoelastic finite difference seismic modelling //Computers & Geosciences. – 2002. – V. 28. – N. 8. – P. 887-899. DOI: 10.1016/S0098-3004(02)00006-7.

9. Komatitsch D. et al. High-order finite-element seismic wave propagation modeling with MPI on a large GPU cluster //Journal of computational physics. – 2010. – V. 229. – N. 20. – P. 7692-7714. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.06.024.

10. Khokhlov N. et al. Applying OpenCL Technology for Modelling Seismic Processes Using Grid-Characteristic Methods //International Conference on Distributed Computer and Communication Networks. – Springer, Cham, 2016. – P. 577-588. DOI: 10.1007/978-3-319-51917-3_49.

11. Beklemysheva K. A., Petrov I. B., Favorskaya A. V. Numerical simulation of processes in solid deformable media in the presence of dynamic contacts using the grid-characteristic method //Mathematical Models and Computer Simulations. – 2014. – V. 6. – N. 3. – P. 294-304. DOI: 10.1134/S207004821403003X.

12. Petrov I. B. et al. Grid-characteristic method using high-order interpolation on tetrahedral hierarchical meshes with a multiple time step //Mathematical Models and Computer Simulations. – 2013. – V. 5. – N. 5. – P. 409-415. DOI: 10.1134/S2070048213050104.

13. Golubev V. I., Petrov I. B., Khokhlov N. I. Numerical simulation of seismic activity by the grid-characteristic method //Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2013. – V. 53. – N. 10. – P. 1523-1533. DOI: 10.1134/S0965542513100060.

14. Moczo P., Kristek J., Gális M. The finite-difference modelling of earthquake motions: Waves and ruptures. – Cambridge University Press, 2014.

15. LeVeque R. J. Finite volume methods for hyperbolic problems. – Cambridge university press, 2002. – V. 31.

16. Nakamura T. et al. Exactly conservative semi-Lagrangian scheme for multi-dimensional hyperbolic equations with directional splitting technique //Journal of computational physics. – 2001. – V. 174. – N. 1. – P. 171-207. DOI: 10.1006/jcph.2001.6888.

17. Dagum L., Menon R. OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming //IEEE computational science and engineering. – 1998. – V. 5. – N. 1. – P. 46-55. DOI: 10.1109/99.660313.