Отчет. Терехов Андрей Валерьевич.

1. **Наименование работы.** Высокопроизводительный параллельный алгоритм для решения прямых задач геофизики.

2. **Состав коллектива исполнителей:** Терехов Андрей Валерьевич, к.ф.м.н., научный сотрудник ИВМиМГ СО РАН.
3. Контактное лицо (ФИО, адрес электронной почты)
   Andrew.terekhov@mail.ru
4. Научное содержание работы:

Постановка задачи: Разработать параллельные численные процедуры для решения динамической задачи теории упругости в 2.5D геометрии.

Современное состояние проблемы.
Математическое моделирование является эффективным инструментом для исследования сейсмических волновых полей при построении моделей сред для реальных геофизических объектов. Проблема численного решения динамических задач теории упругости характеризуются большими объемами, как вычислений, так и данных, поэтому для повышения точности и сокращения времени расчетов необходимо использовать современные суперкомпьютеры. Введение в эксплуатацию вычислительных систем, объединяющих десятки тысяч процессоров порождает проблему разработки параллельных алгоритмов, которые будут эффективными для большого числа процессоров, от1024. Для специалистов в области геофизики значительный интерес представляют геофизические объекты, включающие рельеф местности и высококонтрастные модели сред (зоны малых скоростей, верхняя часть разреза, наличие трещеноватостей и т.д.). Учет этих особенностей приводит к необходимости решения дифференциальных уравнений с сильно меняющимися коэффициентами, и, как следствие, в результате аппроксимации частных производных возникают системы линейных алгебраических уравнений с большим числом неизвестных и “плохими”, с вычислительной точки зрения, спектральными свойствами. Разработка параллельных алгоритмов для решения таких плохообусловленных систем линейных алгебраических уравнений является одной из фундаментальных проблем современной вычислительной линейной алгебры. Решению этой проблемы будет посвящена первая часть исследования.

В задачах сейсмической разведки на сегодняшний день доминируют явные конечно-разностные методы четвертого порядка точности (схемы на разнесенных сетках Staggered Grid). Это обусловлено отсутствием необходимости решения систем линейных уравнений и простотой программной реализации. Преимущество данного класса схем по сравнению со схемами второго порядка состоит в их устойчивости для широкого диапазона параметров

Ламе. Тогда как явные схемы, где компоненты вектора решения определяются в одних и тех же точках, являются неустойчивыми при значениях коэффициента Пуассона близких к 0.5. Существенным недостатком явных схем является эффект численной дисперсии и ограничение сверху на шаг по времени, обусловленное необходимостью удовлетворить условию устойчивости Куранта. Для преодоления этих трудностей предлагается использовать спектрально разностные алгоритмы на основе преобразования Лагерра. В отличие от спектральных алгоритмов на основе преобразования Фурье, преобразование Лагерра позволяет получить знакоопределенную систему линейных уравнений, что существенно упрощает решения всей задачи в целом. Недостаток спектрально-разностных методов состоит в необходимости решения систем линейных уравнений больших размерностей. Однако этот недостаток компенсируется абсолютной устойчивостью алгоритма и отсутствием численной дисперсии. Таким образом, если возможно быстро решать системы эллиптических уравнений, то можно получать более качественное численное решение. Поэтому актуален вопрос о возможности применения спектрально-разностных методов для многопроцессорных вычислительных систем, включающих тысячи процессоров.

Один из ключевых этапов реализации спектрально-разнотсных методов состоит в решении эллиптических уравнений. Сегодня предложены различные подходы к решению эллиптических уравнений второго порядка с неразделяемыми переменными, где итерационный процесс сводится к многократному решению разностного уравнения для оператора Лапласа. Однако реализация экономичных процедур, таких как метод переменных направлений и разделения переменных, требует решения трехдиагональных и блочно-трехдиагональных систем линейных уравнений, что на многопроцессорной системе является нетривиальной задачей. Преодолеть данную трудность можно за счет использования алгоритма дихотомии (Parallel Computing, 2010, Terekhov) , разработанного для обращения одной и той же трехдиагональной матрицы для многих правых частей. Выбор алгоритма дихотомии обусловлен тем, что для данного класса задач он обеспечивает почти линейную зависимость коэффициента ускорения в широком диапазоне числа процессоров.

Полученные результаты

1. В работе предложен новый параллельный алгоритм (Алгоритм Дихотомии) для решения СЛАУ с одной и той же блочно-трехдиагональной матрицей и различными правыми частями.

$$PX=\begin{pmatrix} C_1 & -B_1 & & & 0 \\ -A_2 & C_2 & -B_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -A_{N-1} & C_{N-1} & -B_{N-1} \\ 0 & & & -A_N & C_N \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \overline{\mathbf{X}}_1 \\ \overline{\mathbf{X}}_2 \\ \dots \\ \overline{\mathbf{X}}_{N-1} \\ \overline{\mathbf{X}}_N \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \overline{\mathbf{F}}_1 \\ \overline{\mathbf{F}}_2 \\ \dots \\ \overline{\mathbf{F}}_{N-1} \\ \overline{\mathbf{F}}_N \end{pmatrix}=\mathbf{F}, \quad (1)$$

где $A_j, B_j, C_j \in \Re^{M\times M}$, $\overline{\mathbf{X}}_j, \overline{\mathbf{F}}_j \in \Re^{M}$.

Численные процедуры были реализованы на языке Fortran-90 с использованием библиотеки MPI. Результаты вычислительных экспериментов по оценку эффективности решения задачи (1) приведены в табл. 1., рис 2,3

$N \times M$	$2^{11}\times 60$		$2^{11}\times 150$		$2^{12}\times 60$		$2^{12}\times 150$		$2^{13}\times 60$		$2^{13}\times 150$	
P	Pre	Exe	Pre	Exe	Pre	Exe	Pre	Exe	Pre	Exe	Pre	Exe
32	1	32	17	30	1.9	31	32	31	3.8	32	60	32
64	1.32	177	15	60	2.7	64	22	60	3	64	36	62
128	2	551	19	110	2.1	162	22	116	3	120	30	124
256	3.2	1021	32	240	3.2	896	34.7	255	3.36	480	38	236
512	5.6	979	62	430	5.7	1422	61	430	5.6	1920	65	438
1024	10	1043	124	720	9.9	1337	126	736	9.9	1745	123	845
2048	48.8	436	Θ	Θ	19.44	896	Θ	Θ	47	1920	Θ	Θ

Таблица 1.**Pre**- *Время подготовительных вычислений,* **Exe** – *величина ускорения.* **P-**число процессоров.

Вычислительные эксперименты показали, что разработанный алгоритм Алгоритм Дихотомии для решения блочно-трехдиагональных систем линейных алгебраических уравнений обеспечивает высокую эффективность использования ресурсов суперкомпьютера. При реализации Алгоритма Дихотомии в контексте численных процедур следует обращать внимание на доступный объем оперативной памяти, так как для Алгоритма Дихотомии как и для большинства прямых методов решения СЛАУ требуется больший объем оперативной памяти в сравнении с итерационными методами.

2. Для демонстрации эффективности предлагаемого подхода посредством спектрально-разностного алгоритма решена задача моделирования акустических волновых полей.

$$\rho(x)\frac{\partial^2 p}{\partial t^2}(x,t)=\nabla\left[\kappa(x)\nabla p(x,t)\right]+\frac{1}{2\pi}\frac{\delta(x-x_0)}{r}f(t), \quad t>0, \quad x=(r,z),$$

Высокая производительность Алгоритма Дихотомии позволила эффективно реализовать метод The Domain Decomposition на суперкомпьютере. Необходимо отметить, что метод The Domain Decomposition был реализован не для обеспечения параллельных вычислений, а для сокращения общего числа арифметических действий. Число процессоров и число подобластей в нашем случае являются независимыми величинами, поэтому скорость сходимости итерационного метода не зависит от числа процессоров.

3. Дополнительно, разработка алгоритма дихотомии для быстрого решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трехдиагональными матрицами позволила включить в численную модель поглощающие граничные условия PML

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial t}+\sigma_z\right)p-\rho_0 c^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(v_r r)+\sigma_z\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(qr)+\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)=0, \\ \frac{\partial v_r}{\partial t}-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial r}p=0, \qquad \left(\frac{\partial}{\partial t}+\sigma_z\right)v_z-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial z}p=0, \qquad \frac{\partial q}{\partial t}=v_r, \end{cases}$$

где профиль поглощающих слоев задается функцией $\sigma_z(z)=\frac{(\nu+1)c_p}{2L_{\mathrm{PML}}}\log\left(\frac{1}{|\chi|}\right)\left[\frac{(z-z_0)}{L_{\mathrm{PML}}}\right]^{\nu}$, χ коэффициент поглощения ,v- степень полинома, задающего профиль поглащения , c_p скорость звука, L_{PML} is ширина PML области. Реализация поглощающих граничных условий существенно сократила общий объем вычислений за счет уменьшения область моделирования.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Проведенные вычислительные эксперименты с числом процессоров от 16 до 2048 подтвердили эффективность предлагаемого подхода. Зависимость величины ускорения от числа процессоров была почти линейной. Таким образом, высокая производительность алгоритмов, включающих Алгоритм Дихотомии, позволяет использовать этот метод в уже существующие последовательные численные процедуры для их распараллеливания.

Иллюстрации, визуализация результатов

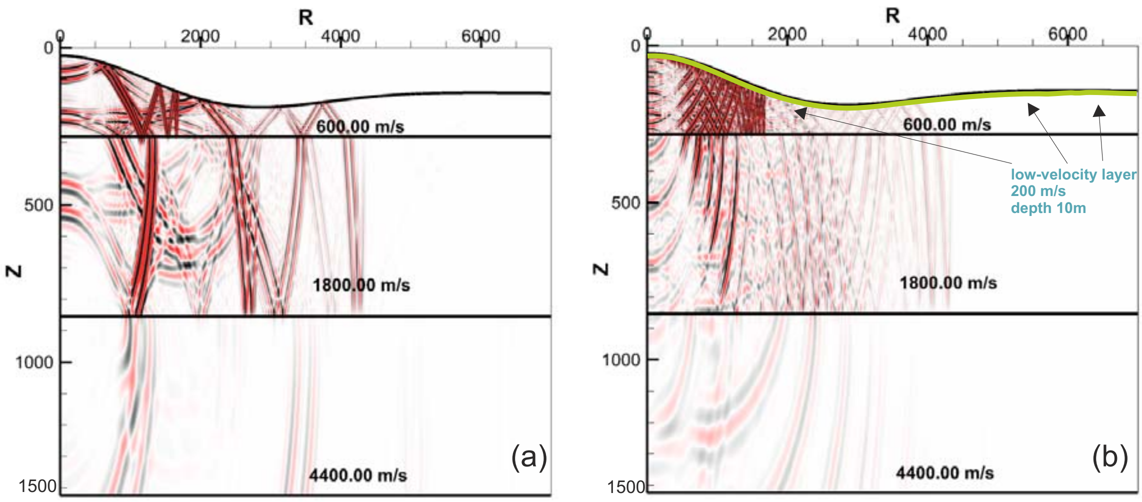

Рис.1 Волновое поле в момент времени t=3s (a) ВЧР, (б) ВЧР+ЗМС.

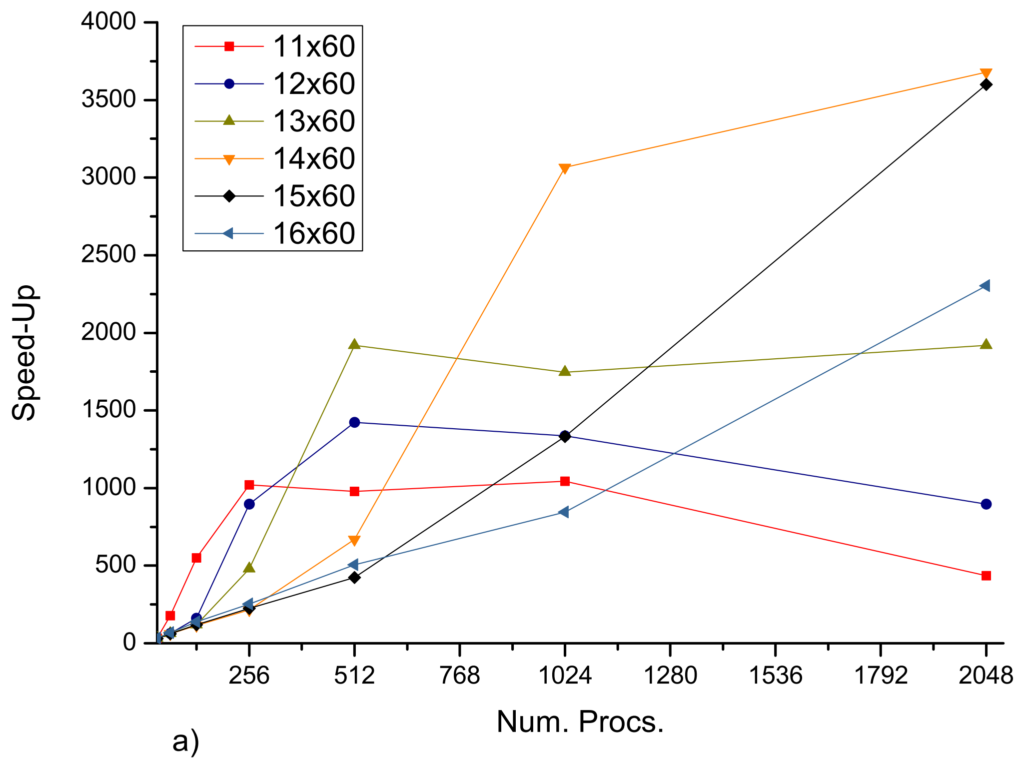

Рис 2. Зависимость величины ускорения от числа процессоров при решении СЛАУ с блочно-трехдиагональными матрицами с размером блока 60 150 и числом блоков 2^k, где k=11…16.

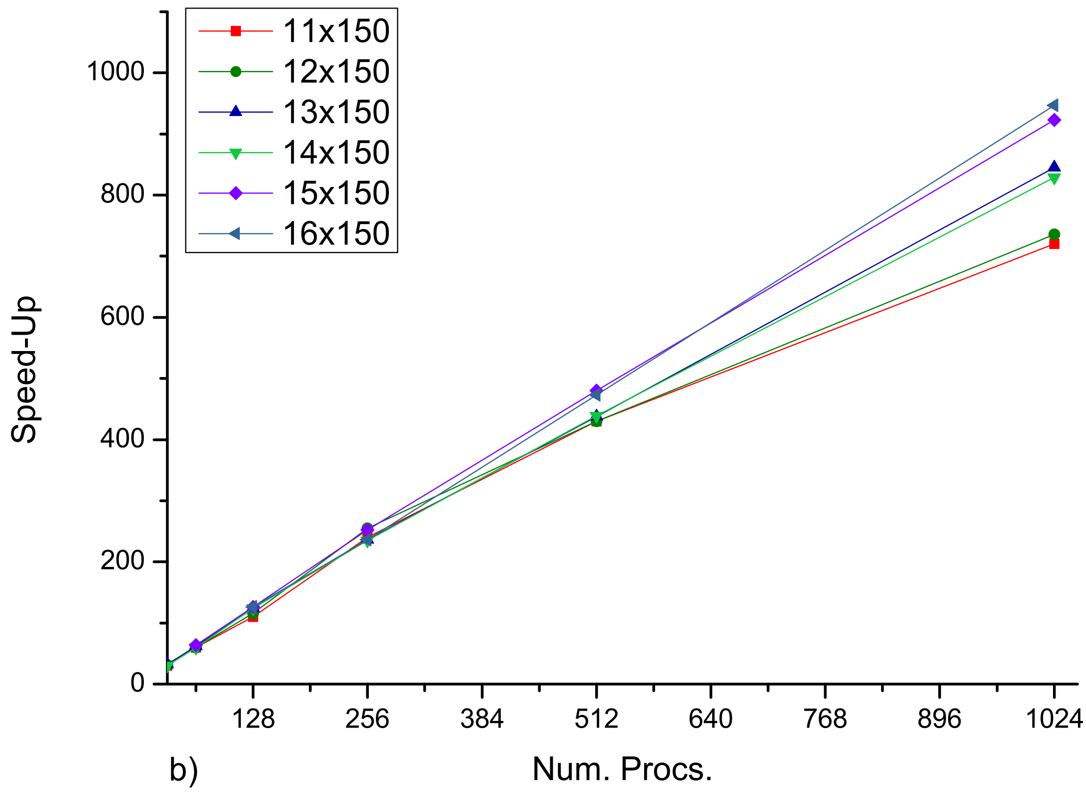

Рис 3. Зависимость величины ускорения от числа процессоров при решении СЛАУ с блочно-трехдиагональными матрицами с размером блока 150 и числом блоков 2^k, где k=11…16.

4. По результатам работы написана и сдана в печать статья

Andrew V. Terekhov. A fast parallel algorithm for solving block-tridiagonal systems of linear equations as applied to the domain decomposition method.

5. 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.