

Кучунова Елена Владимировна

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ
ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ НА
МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2008 г.

Работа выполнена в Федеральном государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования “Сибирский федеральный университет” и в Учреждении Российской академии наук Институте вычислительного моделирования Сибирского отделения РАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Садовский Владимир Михайлович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Добронев Борис Станиславович
кандидат физико-математических наук,
профессор Распопов Виталий Евгеньевич

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук Институт нефтегазовой геологии и геофизики им А.А. Трофимука Сибирского отделения РАН


Защита диссертации состоится “31” октября 2008 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета ДМ 212.099.06 при Сибирском федеральном университете по адресу: 660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд. УЛК 115.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Сибирского федерального университета по адресу: г. Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд. Г 376. Автореферат выставлен на сайте СФУ.

Отзыв на автореферат в 2-х экземплярах, с подписью составителя и заверенный печатью организации просим направлять в адрес диссертационного совета: 660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд. УЛК 319.

Автореферат разослан “30” сентября 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат технических наук, доцент

 Р.Ю. Царев

Общая характеристика работы

Диссертация посвящена разработке численного метода моделирования волновых полей для некоторого класса геофизических сред, созданию комплекса параллельных прикладных программ и исследованию на этой основе распространения волн в сложно построенных средах. При этом рассматриваются все основные этапы решения прикладной задачи (выбор математической модели, построение ее дискретного аналога, разработка численного метода и параллельного алгоритма его реализации на многопроцессорных вычислительных системах).

Актуальность работы

Математические модели механики деформируемых сред, описывающие процессы распространения упругих волн напряжений и деформаций, всегда представляли практический интерес. Математическое моделирование дает физические представления об образовании волн в различных средах. Эти представления положены в основу сейсмических методов исследования, применяемых при изучении внутреннего строения Земли, поиске и разведке полезных ископаемых, в инженерно-геологических изысканиях.

Начиная с работ Релея и Лэмба, математическое моделирование распространения сейсмических волн проводится на основе системы уравнений динамической теории упругости. На практике важно проанализировать сейсмическое волновое поле с учетом всех типов волн, волн интерференционного характера и возникающих при этом "нелучевых" явлений. Совершенствование систем наблюдения и повышение детализации экспериментальной информации приводит к необходимости рассмотрения волновых полей с большей точностью и для все более возрастающих времен. Исключительное значение для исследования распространения сейсмических волн в сложнопостроенных средах имеет вычислительный эксперимент. Однако применение прямых методов численного анализа требует большого объема вычислительных ресурсов. Решение пространственных задач на современном персональном компьютере может оказаться невозможным из-за длительности времени счета. Кроме того, однопроцессорный компьютер зачастую не может обеспечить требуемый объем оперативной памяти для работы с многомиллионными ячейками расчетных сеток, использование которых необходимо для достижения требуемой точности. Эффективным средством решения ресурсоемких пространственных задач является технология параллельных вычислений на распределенных системах кластерного типа. Развитие суперкомпьютеров позволяет

успешно решать задачи в трехмерной постановке.

На пути перехода от персонального компьютера к суперкомпьютеру с параллельной архитектурой имеются определенные трудности, которые, во-первых, связаны с необходимостью распараллеливания вычислительного алгоритма, во-вторых, с принципиально более сложным написанием программного кода, недостаточно развитой системой отладки программ на кластере и пр. При этом одним из факторов эффективного использования высокопроизводительной многопроцессорной вычислительной техники является применение специальных методов. В связи с этим, одной из задач современной науки является развитие технологии математического моделирования, рассматривающей многопроцессорные вычислительные системы (МВС) как основной аппарат для вычислений. Отметим, что методы моделирования с использованием высокопроизводительных компьютеров часто оказываются едва ли не единственным способом получения информации об исследуемых явлениях, так как возможности теоретического и экспериментального изучения этих явлений ограничены методическими и техническими трудностями.

Отметим далее, что за время существования МВС накоплен значительный опыт их использования, и они находятся в массовом доступе (МВС имеются в ряде Российских и в большинстве зарубежных научных институтов). Однако, огромные вычислительные возможности, предоставляемые этими системами, используются недостаточно. Причиной этому является сложность адаптации последовательных алгоритмов и программ к параллельным архитектурам. Поэтому разработка эффективных параллельных алгоритмов решения фундаментальных и прикладных задач, изначально ориентированных на использование МВС (в том числе с распределенной памятью) является чрезвычайно актуальной проблемой.

Цели и задачи исследования

В качестве основной цели исследования выступает разработка эффективного параллельного вычислительного алгоритма моделирования волновых полей в упругих средах на многопроцессорных вычислительных системах. Для достижения поставленной цели сформулированы следующие задачи исследования:

- разработка параллельного вычислительного алгоритма расчета волновых полей в трехмерных кусочно-однородных упругих средах;
- адаптация разработанного алгоритма к многопроцессорным вычислительным системам, которая складывается из выбора методов реализации

алгоритма на параллельных ЭВМ, выявления трудно распараллеливаемых блоков, их оптимизации и верификации;

- создание комплекса параллельных прикладных программ для исследования распространения волн в сложно построенных средах.

Объект исследований

Объектом исследования диссертации являются трехмерные прямые динамические задачи сейсмоки для упругих кусочно-однородных изотропных сред.

Методика исследования

В качестве методики исследований используется вычислительный эксперимент, включающий в себя следующие этапы: математическая формулировка задачи, построение приближенного (численного) метода решения задачи, написание вычислительного алгоритма, программирование на ЭВМ вычислительного алгоритма, проведение расчетов на ЭВМ, анализ полученных численных результатов и уточнение математической модели.

Новые научные результаты, выносимые на защиту

1. Параллельный вычислительный алгоритм для решения гиперболической системы уравнений теории упругости на криволинейных сетках на основе метода двуциклического расщепления по пространственным переменным с использованием ENO-схемы для решения одномерных систем.
2. Универсальный алгоритм распределения многоблочной области по процессорам, основанный на требовании равномерной вычислительной нагрузки.
3. Комплекс параллельных программ для численного моделирования распространения волн в кусочно-однородной среде в трехмерной геометрии, созданный на основе этих алгоритмов.

Научная новизна и практическая ценность

Научная новизна работы заключается в том, что в ней впервые выполнена численная реализация математической модели динамической теории упругости в пространственной постановке на многопроцессорных вычислительных системах. Практическая ценность работы состоит в создании комплекса прикладных программ, который может быть использован в задачах геофизики

(сейсмоки). Разработанные методы, алгоритмы и программы могут применяться в учебном процессе при подготовке специалистов по обработке результатов геофизических исследований.

Апробация работы

Основные результаты работы были представлены на следующих научных конференциях:

1. VIІІ Международной научной студенческой конференции "Студент и научно-технический прогресс" (НГУ, г. Новосибирск, 2005г.);
2. V, VI и VII Всероссийских конференциях по математическому моделированию и информационным технологиям (ИВТ СО РАН, г. Новосибирск, 2004г.; КемГУ, г. Кемерово, 2005г., ИВМ СО РАН, г. Красноярск, 2006г.);
3. IV, V и VI Межрегиональных школах-семинарах "Распределенные и кластерные вычисления" (ИВМ СО РАН, г. Красноярск, 2004г., 2005г., 2006г.);
4. Конференциях-конкурсах молодых ученых ИВМ СО РАН (г. Красноярск, 2005г., 2006г., 2007г.);
5. XXVIII и XXIX Конференциях молодых ученых механико-математического факультета МГУ (МГУ, г. Москва, 2006г, 2007г.);
6. Международных научных конференциях "Параллельные вычислительные технологии" ПаВТ'2007 и ПаВТ'2008 (ЮУрГУ, г. Челябинск, 2007г., СПбГПУ, г. Санкт-Петербург, 2008г.).

Кроме того, результаты диссертации докладывались на семинаре "Проблемы математического и численного моделирования" Института вычислительного моделирования СО РАН, на семинаре кафедры информатики Института математики Сибирского федерального университета, а также на семинаре кафедры волновой и газовой динамики механико-математического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

Публикации

По теме диссертации автором опубликовано 10 работ (из них 2 по списку ВАК). Из работ, выполненных совместно, в диссертацию включены результаты, полученные автором лично. Список публикаций помещен в конце автореферата.

Работа выполнялась при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 04-01-00267 и 08-01-00184), Комплексной Программы фундаментальных исследований Президиума РАН N 17 “Параллельные вычисления на многопроцессорных вычислительных системах” и N 14 “Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий”, Красноярского краевого фонда науки (шифр гранта 17G036).

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, содержащего 123 наименований, и двух приложений. Диссертация содержит 66 рисунков. Объем диссертации составляет 133 страницы, приложений – 15 страниц.

Основное содержание работы

Во **введении** приводится общая характеристика диссертации, а также кратко излагается содержание диссертации, указывается ее научная новизна и формулируются основные результаты работы.

В **первой главе** раскрывается современное состояние проблем, связанных с численным решением задач теории упругости на многопроцессорных вычислительных системах. В силу того, что данная работа включает несколько разделов, относящихся к различным математическим дисциплинам, данный обзор разделен на пять частей. В разделе 1.1 дается обзор работ, посвященных методам моделирования волновых процессов в упругих средах. В разделе 1.2 рассмотрены основные методы дискретизации расчетной области. В разделе 1.3 представлены работы, посвященные построению разностных схем для решения гиперболических систем уравнений. В разделе 1.4 дан обзор методов моделирования неотражающих граничных условий. Раздел 1.5 посвящен основам организации вычислений на многопроцессорных системах, эффективному их использованию в решении больших задач.

Во **второй главе** диссертации рассматривается алгоритм решения трехмерной упругой задачи с помощью метода двуциклического расщепления по пространственным координатам и применения известной монотонной ENO-схемы “предиктор-корректор”.

В п. 2.1 дается математическая постановка задачи восстановления волновых полей в кусочно-однородной области $\Omega \in \mathbb{R}^3$ по заданном силам внешнего воздействия. Предполагается, что исходная среда имеет сложную структуру – содержит внутренние поверхности раздела материалов с существенно

различающимися механическими свойствами, например, жесткие включения небольшого размера. Внутри области выполняется замкнутая система уравнений линейной динамической теории упругости, имеющая следующий вид:

$$\begin{aligned}\rho \dot{\mathbf{v}} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} &= \lambda(\nabla \cdot \mathbf{v})I + \mu(\nabla \otimes \mathbf{v} + \mathbf{v} \otimes \nabla).\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь ρ – плотность материала, λ и μ – параметры Ламе, определяющие упругие свойства, \mathbf{v} – вектор скорости, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, ∇ – градиент по пространственным координатам, I – единичный тензор. Точка над символом, как обычно, означает производную по времени. Предполагается, что в Ω задано начальное распределение скоростей и напряжений:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}^0(\mathbf{x}), \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, 0) = \boldsymbol{\sigma}^0(\mathbf{x}).\tag{2}$$

Кроме того, известны внешние силы, действующие на части границы Ω – на дневной поверхности:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q},\tag{3}$$

где \mathbf{n} – вектор внешней нормали. На остальной части задаются неотражающие граничные условия, моделирующие беспрепятственное прохождение волн. Эти условия формулируются в некотором специальном виде на этапе построения вычислительного алгоритма. На внутренних границах раздела векторы скорости \mathbf{v} и векторы напряжений $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ предполагаются непрерывными, что соответствует жесткой склейке блоков.

В п 2.2 описывается алгоритм построения расчетной сетки на основе алгебраического метода, состоящего в нахождении взаимно-однозначного отображения вычислительной области в виде единичного куба $[0, 1]^3$ с равномерной сеткой на физическую область. Перед построением сетки для аппроксимации граничных поверхностей области и внутренних поверхностей раздела исходная кусочно-однородная область Ω представляется регулярным набором блоков: $\Omega = \bigcup_{i=1}^{m_1} \bigcup_{j=1}^{m_2} \bigcup_{k=1}^{m_3} \Omega_{ijk}$, где m_1 – количество слоев, m_2 – количество полос в слое и m_3 – количество блоков в полосе. Далее расчетные сетки строятся независимо в каждом блоке, шаг сетки выбирается в зависимости от упругих свойств материала и характерной длины возбуждаемых волн. Отображение вычислительной области на физическую область блока ищется в виде многомерного кубического сплайна: $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i,j,l=0}^3 \mathbf{c}_{ijl} (\xi_1)^i (\xi_2)^j (\xi_3)^l$. Векторные коэффициенты \mathbf{c}_{ijl} находятся в явной форме из условий сопряжения в вершинах блоков, заключающихся в том, что положения вершин заданы, а направления выхода координатных линий в вершинах определяются из соображений ортогональности.

В п. 2.3 строится вычислительный алгоритм на основе сеточно-характеристического метода. При построении разностной схемы в задаче (1)–(3) исходная система (1) записывается в матричной форме:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \sum_{i=1}^3 A_i \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i}. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{u} = [\mathbf{v}, \sigma]^T = (v_1, v_2, v_3, \sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12})^T$ – вектор-функция, составленная из компонент вектора скорости и тензора напряжений, A_i – матрицы-коэффициенты размерности 9×9 , произведение которых на вектор \mathbf{u} задается равенством

$$A_i \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\rho} \mathbf{e}_i \cdot \sigma \\ \lambda(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v})I + \mu(\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{v} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{e}_i) \end{bmatrix},$$

где $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ – орты декартовой системы координат.

Для решения системы (4) используем схему интегрирования на основе метода двуциклического расщепления. При этом расщепление проводится не в физическом, а в параметрическом пространстве. Исходную систему преобразуем к виду

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \sum_{i=1}^3 \tilde{A}_i \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi_i}, \quad \tilde{A}_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} A_j. \quad (5)$$

С учетом обозначения $\boldsymbol{\alpha}^i = \nabla \cdot \xi_i$, получается следующая формула для вычисления произведения матриц на вектор:

$$\tilde{A}_i \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\alpha}^i \cdot \sigma \\ \lambda(\boldsymbol{\alpha}^i \cdot \mathbf{v})I + \mu(\boldsymbol{\alpha}^i \otimes \mathbf{v} + \mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\alpha}^i) \end{bmatrix}.$$

Применение метода двуциклического расщепления по пространственным переменным к системе (5) приводит к серии из шести одномерных задач на интервале $t \in [t_n, t_n + \tau]$. Каждая их полученных одномерных систем является гиперболической, обладает полным набором собственных векторов с действительными собственными значениями, поэтому каждую из таких систем можно переписать в виде

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = Q^{-1} \Lambda Q \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi}, \quad (6)$$

где Q – матрица, составленная из линейно-независимых собственных векторов, Λ – диагональная матрица, элементами которой являются собственные

значения. Для направления $\xi = \xi_i$

$$\Lambda = \text{diag}\{c_p|\boldsymbol{\alpha}^i|, -c_p|\boldsymbol{\alpha}^i|, c_s|\boldsymbol{\alpha}^i|, c_s|\boldsymbol{\alpha}^i|, -c_s|\boldsymbol{\alpha}^i|, -c_s|\boldsymbol{\alpha}^i|, 0, 0, 0\},$$

$|\boldsymbol{\alpha}^i| = \sqrt{(\alpha_1^i)^2 + (\alpha_2^i)^2 + (\alpha_3^i)^2}$, $c_p = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ – скорость продольных волн, $c_s = \sqrt{\mu/\rho}$ – скорость поперечных волн в среде.

К одномерным системам (6) применяется явная монотонная ENO-схема предиктор-корректор с предельной реконструкцией решения. На шаге “предиктор”, исходя из характеристических соображений, по известным значениям на n -м временном слое вычисляются значения решения на границах ячеек. Система (6) после замены неизвестной вектор-функции по формуле $\mathbf{w} \equiv Q\mathbf{u}$ распадается на девять независимых скалярных уравнений переноса

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \Lambda \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \xi},$$

для решения которых из узла $(\xi_j, t_n + \tau/2)$ ($j = 0, 1, \dots, N$) опускаются характеристики на слой $t = t_n$. Компоненты вектора \mathbf{w} постоянны вдоль характеристик, поэтому $w_k^{n+1/2}(\xi_j) = w_k^n(\xi_j + \lambda_{k,j+1/2} \tau/2)$, где $\lambda_{k,j+1/2}$ – угловой коэффициент k -ой характеристики в j -ой ячейке. Характеристики, проведенные из узла $(\xi_j, t_n + \tau/2)$, могут не попасть точно в расчетные узлы $(\xi_{j\pm 1/2}, t_n)$, в которых определено решение, поэтому применяется процедура предельной реконструкции: сеточная функция w_k^n с узловыми значениями $w_{k,j+1/2}^n$ на каждом из отрезков $[\xi_j, \xi_{j+1}]$ заменяется кусочно-линейным сплайном $\tilde{w}_k^n(\xi) = a_{k,j+1/2}^n \xi + w_{k,j+1/2}^n$, коэффициенты которого подбираются из условия минимума суммы модулей скачков сплайна на границах ячеек. В итоге вектор $\mathbf{w}_j^{n+1/2}$ имеет следующий вид:

$$w_{kj}^{n+1/2} = \begin{cases} w_{k,j+1/2}^n - \frac{a_{k,j+1/2}^n}{2} (\xi_{j+1} - \xi_j) + \frac{\tau}{2} \lambda_{k,j+1/2} a_{k,j+1/2}^n, & \text{если } \lambda_{k,j+1/2} \geq 0, \\ w_{k,j-1/2}^n + \frac{a_{k,j-1/2}^n}{2} (\xi_j - \xi_{j-1}) + \frac{\tau}{2} \lambda_{k,j-1/2} a_{k,j-1/2}^n, & \text{если } \lambda_{k,j-1/2} < 0. \end{cases}$$

После этого восстанавливается искомое решение: $\mathbf{u}_j^{n+1/2} = Q^{-1} \mathbf{w}_j^{n+1/2}$.

Последнюю формулу нельзя использовать в приграничных ячейках, поскольку в нее входят величины $w_{k,j\pm 1/2}^n$ в точках, которые находятся за пределами области интегрирования. Корректное решение задачи на границе требует постановки граничных условий в количестве, равном числу уходящих характеристик. Для левой границы области уходящими являются характеристики, отвечающие отрицательным собственным значениям, для правой границы – положительным. В качестве недостающих условий на дневной поверхности области Ω выступают граничные условия (3). На остальной части

поверхности ставятся искусственные граничные условия на основе принципа неотражения волн. Следуя этому принципу, полагаются равными нулю граничные значения характеристических переменных на уходящих характеристиках, что эквивалентно отсутствию отраженных волн в одномерной задаче. В случае, если граница блока не является внешней, для вычисления значений в граничных ячейках $(\mathbf{u}_0^{n+1/2}, \mathbf{u}_N^{n+1/2})$ используется алгоритм склейки решения на границах соседних блоков.

Для сохранения свойств консервативности схемы на криволинейных сетках, когда матрицы-коэффициенты \tilde{A}_i зависят от координат, аппроксимация одномерных систем уравнений на шаге “корректор” производится с помощью интегро-интерполяционного метода. В результате интегрирования системы (5) по криволинейной ячейке в физической области с последующим применением формулы Грина получается следующее равенство

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} = \frac{1}{\omega} \sum_{k=1}^6 \gamma^k (n_1^k A_1 + n_2^k A_2 + n_3^k A_3) \mathbf{u}^k, \quad (7)$$

в котором n_i – направляющие косинусы внешней нормали, ω – объем ячейки, $\bar{\mathbf{u}}$ – среднее интегральное значение вектора-решения, а индекс k относится к граням ячейки, в частности γ^k – площадь соответствующей грани. Далее сумма в правой части (7) разбивается на три пары слагаемых по противоположным граням, каждая из которых отвечает аппроксимации производных по пространственным переменным в одномерных системах (6). Например, слагаемые, относящиеся к координатным поверхностям ξ_2, ξ_3 , дают аппроксимацию выражения $\tilde{A}_1 \partial \mathbf{u} / \partial \xi_1$.

Заметим, что применяемая схема решения одномерных задач является вариантом сеточно-характеристической схемы второго порядка точности в областях монотонного поведения исходных функций. Метод двуциклического расщепления сохраняет второй порядок. Кроме того, двойной пересчет одной и той же системы уравнений на третьем и четвертом этапах расщепления гарантирует устойчивость метода при выполнении одномерного условия Куранта–Фридрихса–Леви.

В третьей главе излагается технология распараллеливания предложенного во второй главе вычислительного алгоритма для многопроцессорных вычислительных систем кластерного типа с распределенной памятью.

В п. 3.1 обсуждаются основные проблемы реализации параллельных алгоритмов, связанные с необходимостью осуществления в ходе вычислений межпроцессорных обменов и записи результатов в файлы, что влечет за собой замедление, а следовательно снижение эффективности распараллеливания. Формулируются основные критерии качества параллельных реализа-

ций алгоритмов. Во-первых, это их ускорение с ростом числа процессоров, во-вторых, – адекватность воспроизведения моделируемых явлений. Дается определение ускорения алгоритма как отношения времени счета последовательного алгоритма ко времени счета параллельного варианта, эффективность распараллеливания определяется как отношение ускорения к количеству процессоров, на котором оно достигнуто, в процентах. Стопроцентная эффективность соответствует идеальному ускорению, когда использование n процессоров в вычислениях дает ускорение в n раз. На практике же наблюдается снижение эффективности с ростом числа процессоров, что связано с наличием в программе существенно последовательных фрагментов, разбалансировки вычислений в параллельных процессах и межпроцессорных обменов.

Для сбалансированности вычислений и минимизации межпроцессорных обменов ключевая роль отводится выбору способа распределения данных и вычислений по процессорам. Для выбора конкретной технологии распараллеливания алгоритма в п.3.2 приводится сравнение двух наиболее распространенных технологий MPI и DVM на примере решения одномерной задачи распространения упругой волны сжатия в неоднородном стержне:

$$\begin{aligned} \rho(x) \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial \sigma}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial t} - \rho(x) c^2(x) \frac{\partial v}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \tag{8}$$

Здесь $v(t, x)$ – скорость частиц в направлении оси стержня, $\sigma(t, x)$ – напряжение на площадке, нормальной к оси; заданные функции: $\rho(x) \geq \rho_0 > 0$ и $c(x) > 0$ имеют смысл плотности среды и скорости распространения волн. Для однозначного определения решения задаются начально-краевые условия. В начальный момент времени стержень находится в покое, поэтому: $v(0, x) = 0$, $\sigma(0, x) = 0$. На левой границе задано значение скорости: $v(t, 0) = v(t)$, на правой – напряжение: $\sigma(t, 1) = 0$. Исходная система уравнений (8) решается численно монотонной ENO-схемой с предельной реконструкцией.

В работе подробно описывается каждая из сравниваемых технологий. Обе эти технологии основываются на принципе геометрического параллелизма. Исходную вычислительную область $\{x \in [0, 1], t \in [0, T)\}$ делится на вертикальные полосы по числу процессоров, каждый из которых вычисляет неизвестные функции только на своей полосе, обмениваясь при необходимости граничными значениями с соседними процессорами. В случае технологии MPI каждый процесс самостоятельно строит часть сетки в своей полосе, причем сетки соседних процессов пересекаются по двум узлам. Это пересечение сеток позволяет частично продублировать вычисления на соседних

процессорах, что сокращает межпроцессорные обмены. Далее в каждом процессе происходят вычисления последовательно по шагам по времени на части сетки. На каждом шаге по времени соседние процессы осуществляют обмен граничными значениями при помощи функции пересылки `MPI_Sendrecv`. По окончании расчетов каждый процесс обрабатывает свой массив вычисленных значений, записывая его в отдельный файл.

В случае технологии DVM необходимо написать только один вариант программы и для последовательного и для параллельного выполнения. Эта программа содержит правила параллельного выполнения алгоритма, остающиеся “невидимыми” для стандартных компиляторов для последовательных ЭВМ. Все используемые в программе массивы (массив сетки, массивы решения и т.п.) определяются как распределенные следующей DVM-директивой: `DVM(DISTRIBUTE[BLOCK]) double *X`, где `X` – распределенный массив. Распределение определяется однозначным соответствием каждого элемента массива и номером процессора, на который элемент распределен. На каждом процессоре вычисляется только локальная часть массива при помощи специализированных “распределенных циклов”. Для доступа к “удаленным данным” (данные, используемые на одном вычислительном узле, но размещенные на другом) применяются специальные “теневые” грани, представляющие собой буфер, непрерывно продолжающий локальную секцию массива на указанное количество ячеек. В нашем случае таких теневых граней было по одной с каждой стороны секции массива. В процессе расчетов возможны случаи синхронного и асинхронного обновления теневых граней. В первом случае обновление теневых граней является непрерывной операцией, и делится на две: запуск обмена и ожидание значений. Выполнение обменов осуществляется одновременно всеми вычислительными узлами. При асинхронном обновлении вычисление и обмен являются независимыми операциями и могут выполняться одновременно. Так на фоне ожидания значений теневых граней выполняются вычисления, в частности, вычисления на внутренней области локальной секции массива.

Описанные технологии распараллеливания использовались при написании двух параллельных программ: одна на языке C с применением библиотеки функций передачи сообщений MPI, вторая – на языке CDVM. Параллельные программы запускались на кластерах МВС-1000/16 Института вычислительно моделирования СО РАН (г. Красноярск) и МВС-1000/М Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (г. Москва). Параллельные программы тестировались на модельных задачах. В качестве модельной задачи выбирается случай однородной среды. На этой задаче сравнивались два варианта DVM-программ с различными типами обновления теневых граней. При

запуске параллельных программ измерялось время их работы в секундах. На основе данных о времени работы программ (приведены в тексте диссертации) вычислялись другие характеристики параллельных программ, такие как ускорение и эффективность распараллеливания.

В диссертации приводятся полученные графики зависимости ускорения алгоритмов и эффективности распараллеливания в зависимости от количества используемых процессоров. Были рассмотрены случаи мелкой (10^4 узлов) и крупной (10^3 узлов) сетки. На основании полученных данных об ускорении и эффективности распараллеливания делается вывод о целесообразности применения MPI-технологии при распараллеливании вычислений на достаточно большом числе процессоров. Данный результат согласуется с выводами сделанными в ИПМ им. Келдыша РАН по сравнению различных подходов по распараллеливанию на широко известных тестах NAS (NPB 2.3).

В п. 3.3 описывается технология распределения вычислений по процессорам, в основе которой лежит принцип геометрического параллелизма – параллелизма данных или декомпозиции области. В соответствии с ним при расчетах на МВС производится разбиение области на подобласти по числу используемых вычислительных узлов, исходя из требования равномерной загрузки. При этом каждый процессор производит вычисления в своей расчетной подобласти. Расчет во всех подобластях происходит одновременно и при необходимости процессоры обмениваются информацией между собой по каналам связи.

Для распределения построенной глобальной сетки на заданное количество процессоров поступаем следующим образом. Если размерность сетки в одном блоке больше среднего количество ячеек, приходящихся на один процессор, то этот блок обслуживается несколькими процессорами и наоборот, один и тот же процессор обрабатывает несколько соседних блоков, если их суммарная размерность не превышает средней. При разбиении блока на несколько процессоров используются 1D-, 2D- или 3D-разбиения. Конкретный способ разбиения выбирается в зависимости от размерности сетки в блоке по всем координатным направлениям, с учетом минимизации количества граничных ячеек, определяемого формулой:

$$F(k_1, k_2, k_3) = (k_1 - 1) N_1 N_3 + (k_2 - 1) N_1 N_3 + (k_3 - 1) N_1 N_2,$$

где k_1 , k_2 и k_3 – количества разбиений облака вдоль координатных линий. Предполагается, что $m = k_1 \times k_2 \times k_3$ – количество частей, на которое разбивается блок. Таким образом, получаем, что на каждый процессор распределяется некоторая часть глобальной сетки. На этой части производятся все дальнейшие вычисления. В п.3.3 диссертации приведено подробное описание

разделения глобальной сетки на локальные для процессора с определенным номером.

В п. 3.4 описывается организация межпроцессорных обменов, осуществляемых в ходе численного решения задачи. При этом введены три группы межпроцессорных обменов: обмены внутри одного блока первого и второго уровней и обмены между блоками. Обмены внутри блока первого уровня выполняются на каждом шаге численного интегрирования на этапе предельной реконструкции и осуществляются между процессорами, обрабатывающими один блок. В п.3.4.1 введены понятия внешней границы локальной секции блока, распределенной на данный процессор, и внутренней границы. При внутриблочном обмене процессор посылает соседним процессорам значения внутренней границы и принимает значений внешней границы. В случае, если блок распределен на один процессор, внутриблочных обменов первого уровня не выполняется.

Кроме этого, межпроцессорные обмены в ходе численного решения задачи осуществляются также на этапе склейки решения на граничных поверхностях соседних блоков в случае, если эти блоки обрабатываются на разных процессорах. При этом, если внутренняя граница блока распределена на несколько процессоров, перед выполнением процедуры склейки множество значений решения на этой границе пересылаются со всех обрабатывающих эту границу процессоров на один из процессоров. Таким образом на одном процессоре собирается все множество вычисленных сеточных функций на границе блока. Такого рода обмены названы в работе внутриблочными обменами второго уровня.

Третий вид обменов, межблочные обмены, осуществляются при осуществлении процедуры склейки решения на граничных поверхностях соседних блоков. При этом, один из процессоров, обрабатывающих внутреннюю границу блока все множество граничных значений (собранные при помощи внутриблочных обменов второго уровня) посылает процессору, обрабатывающему внутреннюю границу соседнего блока и получает от этого процессора множество значений на внешней границе. Предполагается, что множество граничных значений соседнего блока также уже собрано на одном из процессоров посредством внутриблочных обменов второго уровня.

В п. 3.5 дается описание принципов создания комплекса параллельных прикладных программ, реализующих разработанный вычислительный алгоритм. Программный комплекс на алгоритмическом языке Fortran-90 с использованием библиотеки MPI состоит из трех частей: программы-препроцессора, выполняющей подготовку данных и построение сетки, программы-процессора, выполняющую непосредственно счет и программы-постпроцессора,

осуществляющую обработку полученных данных. Предусматривается возможность повторного запуска программы с другим количеством используемых процессоров на основе результатов, полученных в предыдущем запуске. Кроме того, разделение построения сетки и расчетов позволяет производить серию независимых расчетов одной задачи с различными параметрами без перекомпиляции программы. Исходные данные программ хранятся в виде текстовых файлов, вычисленные данные записываются в двоичные файлы. Визуализация решения осуществляется при помощи синтетических сейсмограмм и поверхностей уровня решения.



Рис. 1: Эффективность распараллеливания вычислений в случае "крупной сетки"(а) и "мелкой сетки"(б)

В п. 3.6 приводятся результаты оценки эффективности параллельной реализации алгоритма. На рис. 1 представлены графики эффективности распараллеливания от числа используемых вычислительных узлов в случае "крупной сетки" (60^3 расчетных узлов) и в случае "мелкой сетки" (200^3 узлов сетки). Средний уровень эффективности распараллеливания составляет около 80%, что связано с неизбежными затратами времени на организацию межпроцессорных обменов и записи результатов в файл. Приведены обобщенные статистические данные по времени счета одного шага в зависимости от объема пересылок и от количества ячеек, в которых значения искомых величин записываются в двоичные файлы. Под объемом пересылок понимается число граничных ячеек сеточной области, через которые осуществляются межпроцессорные обмены. Данные собраны на основании расчетов серии модельных задач на разном количестве процессоров (от 2 до 32) при вычислительной нагрузке на один процессор в 10^6 ячеек. Результаты показывают, что время счета одного шага колеблется от 1 до 3 минут в зависимости от объема пересылок и количества записей в файл. Увеличение последних, естественным образом ведет к увеличению времени счета.

Четвертая глава посвящена результатам численного исследования разработанного вычислительного алгоритма на ряде модельных задач. В п. 4.1 обсуждаются основные принципы проведения вычислительного эксперимента. Во всех предложенных моделях исходная среда ограничена прямоугольной областью для облегчения постановки искусственных граничных условий. Исходная нагрузка действует по нормали к верхней грани области. Функция источника (синусообразный импульс) имеет вид: $P(t) = P_0 \sin(\omega t)$, если $t \leq T$, где P_0 – амплитуда и ω – частота генерируемых волн в среде. Верхняя часть области, за исключением зоны приложения импульсной нагрузки, считается свободной от напряжения. На остальных гранях ставятся неотражающие условия, которые соответствуют бесконечной протяженности массива и формируются для одномерных систем с помощью уравнений на характеристиках.

Далее приводятся результаты вычислительных экспериментов на модельных задачах. Для каждой представленной задачи дается подробное описание исходной среды и геометрии ограничивающей эту среду области, приводятся положение и характеристики источника колебаний, условия проведения вычислений: количество используемых процессоров, вычислительная нагрузка на один процессор, время счета. Для каждой задачи выписываются уравнения годографов получаемых волн исходя из законов геометрической оптики. С этими годографами сравниваются полученные численные результаты, визуализированные при помощи поверхностей уровня и синтетических сейсмограмм.

В п. 4.2 рассматривается задача Лэмба о действии сосредоточенной нагрузки на упругое полупространство. Рассматриваемая упругая среда ограничена прямоугольной областью $ABCD A_1 B_1 C_1 D_1$ (рис. 2). Параметры среды: $\rho = 7850 \text{ кг/м}^3$, $c_p = 6000$ и $c_s = 3210 \text{ м/с}$. Исходная импульсная нагрузка действует в центре верхней грани области. Время действия нагрузки $T = 0.005 \text{ с}$. Величина амплитуды колебаний $P_0 = 250 \text{ МПа}$. Размеры расчетной области: $200 \times 400 \times 400 \text{ м}$. Расчеты проводились на сетке из $200 \times 400 \times 400$ узлов. Шаг по времени выбирался в соответствии с условием Куранта–Фридрихса–Леви и составил 0.0016 с . Среднее время расчета одного шага по времени на 32-х вычислительных узлах кластера МВС–1000 – 2 минуты.

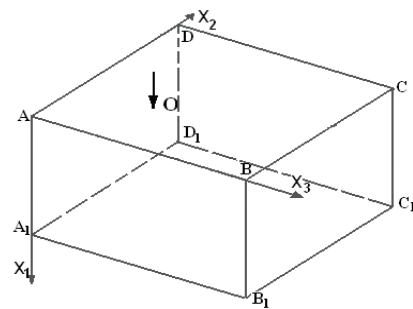


Рис. 2: Действие сосредоточенной нагрузки на упругую прямоугольную область

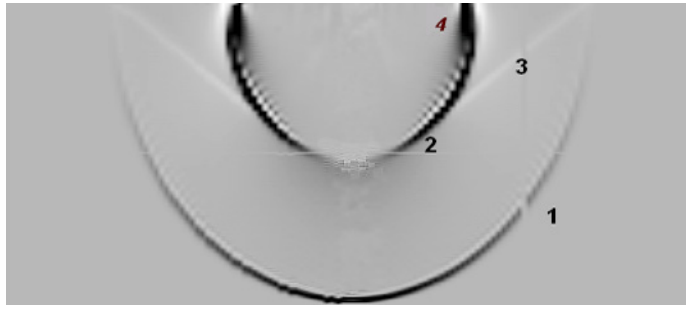


Рис. 3: Действие сосредоточенной нагрузки на упругую прямоугольную область

На рис. 3 представлена визуализация u_1 в фиксированный момент времени 0.016 с. Здесь введены следующие цифровые обозначения: 1 - продольная волна, 2 - поперечная волна, 3 - головная поперечная волна, 4 - поверхностная волна Релея. Результаты соответствуют точному решению задачи для случая плоского деформированного состояния: видны продольная и поперечная волны, менее интенсивные головные волны и волны Релея, которым на рисунках соответствуют движущиеся точки на поверхности $x_1 = 0$. На рис. 4 приведено волновое поле нормального напряжения.

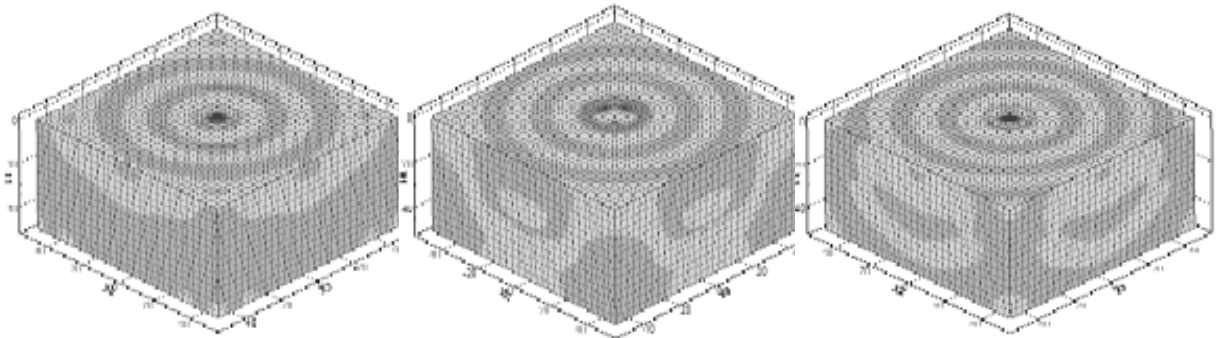


Рис. 4: Поверхности уровня напряжения σ_{11} в моменты времени 0.02, 0.03 и 0.04 с

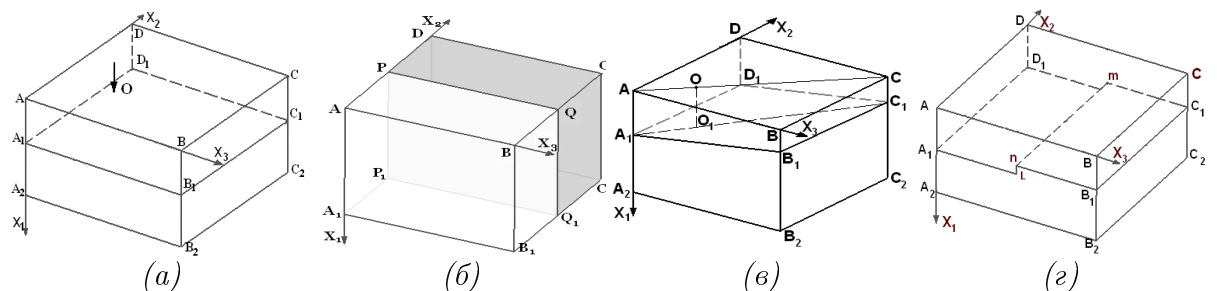


Рис. 5: Модели с различными границами раздела сред: а – горизонтальная, б – вертикальная, в – наклонная, г – граница со сбросом

В п. 4.3 представлены задачи о прохождении волн через различные границы раздела сред (рис. 5). Рассматривается горизонтальная (а), вертикальная

(б) и наклонная (в) типы границы раздела сред. Также рассматривается среда с границей, имеющей небольшой вертикальный сброс (г). Во всех задачах параметры среды подобраны с учетом условия разрыва акустической жесткости на границе раздела сред, что обеспечивает образование отраженных и преломленных волн при переходе падающих волн через поверхность раздела. Результаты расчетов представлены в виде фрагментов визуализаций вертикальной компоненты вектора перемещения и синтетических сейсмограмм. Расчеты показывают образование всех типов отраженных и преломленных волн, и также головных продольных волн. Для этих типов волн приведены уравнения теоретических годографов. Рассчитываются время и точка выхода отраженных волн и головных волн на дневную поверхность области. Полученные численные решения полностью соответствуют теоретическим. Кроме того, в задаче с вертикальным сбросом в решении явно видны образовавшиеся дифрагированные волны от отражения падающих волн от угла сброса. На рис. 6 представлены фрагменты визуализации вертикальной компоненты вектора перемещения вертикальных профилей, секущих сброс под различными углами: 0° (а), 11° (б), 26.5° (в), 37° (г) и проходящими через источник импульса. Здесь введены следующие обозначения: 1 – падающая Р-волна; 2 – отраженная РР-волна; 3 – отраженная PS-волна; 4 – преломленная РР-волна; 5 – преломленная PS-волна; 6, 7 – дифрагированные волны. Как видно из рисунков, с увеличением угла, под которым вертикальная плоскость пересекает линию сброса, сферический фронт дифрагированной волны переходит в эллиптический. Это связано с тем, что каждая точка грани сброса порождает конус лучей, не лежащих в одной плоскости. Полученные численные результаты согласуются с результатами, полученными в Институте вычислительной математики и геофизики СО РАН

В **заключении** кратко перечислены основные результаты диссертационной работы, выносимой на защиту.

В двух последующих приложениях содержатся иллюстрации к диссертационной работе. В **Приложении 1** представлены блок-схемы программного модуля "процессор" и его фрагмента, относящегося к алгоритму численного решения задачи. В **Приложении 2** представлены иллюстрации к главе 4 с результатами численных расчетов.

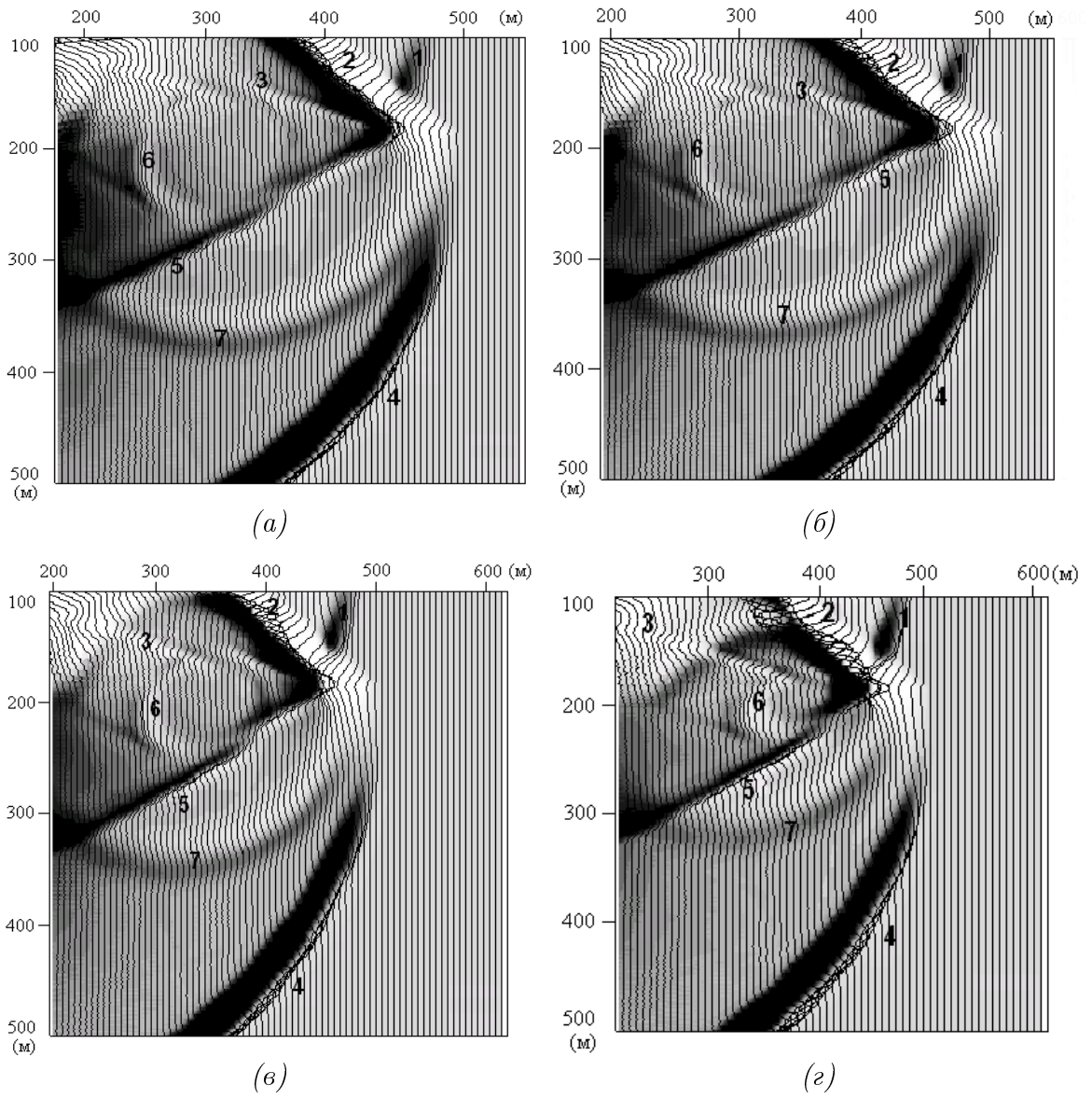


Рис. 6: Визуализация вертикального перемещения для профилей, секущих сброс под различными углами: 0° (а), 11° (б), 26.5° (в), 37° (г)

Заключение

В диссертационной работе получены следующие результаты:

1. Предложен эффективный параллельный вычислительный алгоритм решения динамических задач моделирования сейсмических волновых полей в кусочно-однородных упругих средах, основанный на расщеплении пространственной задачи теории упругости на серию одномерных задач.
2. Алгоритм реализован в виде программного комплекса на языке программирования Fortran-90 с использованием функций библиотеки передачи сообщений MPI. Технология распараллеливания вычислений основана на разделении исходной области по процессорам, исходя из требований равномерной загрузки. Программный комплекс позволяет получать результаты, которые могут быть использованы в прикладных геофизических программах, таких как Promax или SeisView для анализа синтетических сейсмограмм.
3. Проведены численные расчеты модельных задач на многопроцессорной вычислительной системе МВС-1000 Института вычислительного моделирования СО РАН. Результаты расчетов подтверждаются теоретическими выкладками, основанными на законах геометрической оптики, и согласуются с результатами, полученными в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.

Список публикаций по теме диссертации

Статьи в ведущих научных журналах, включенных в перечень ВАК:

1. *Кучунова, Е.В.* Вычислительный алгоритм для расчета волновых полей в блочных средах на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова, В.М. Садовский // Журнал Сибирского федерального университета. Математика и физика. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. – Красноярск, 2008. – N 2. – С. 210-220.
2. *Кучунова, Е.В.* Численное исследование распространения сейсмических волн в блочных средах на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова, В.М. Садовский // Вычислительные методы и программирование. – 2008. – Т.9. – N 1. – С.70-80.

Другие публикации:

3. *Кучунова, Е.В.* DVM и MPI-технологии распараллеливания в одномерной динамической задаче теории упругости / Е.В. Кучунова // Тезисы

докладов V Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. – Новосибирск, 2004. – С.24.

4. *Кучунова, Е.В.* Комплекс прикладных программ для численного решения пространственных задач динамической теории упругости на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова, О.В. Садовская, В.М. Садовский // Материалы IV межрегиональной школы-семинара "Распределенные и кластерные вычисления". – Красноярск, 2005г. – С.159-172.
5. *Кучунова, Е.В.* Вычислительный алгоритм для расчета упругих волн на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова // Материалы VI Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. – Кемерово, 2005г. – С.22
6. *Кучунова, Е.В.* Вычислительный алгоритм для расчета упругих волн в блочной среде на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова // Труды XXVIII Конференции молодых ученых ММФ МГУ им. М.В.Ломоносова. – Москва, 2006г. – С.100-104.
7. *Кучунова, Е.В.* Параллельный алгоритм расчета упругих волн в блочной среде / Е.В. Кучунова // Материалы VI межрегиональной школы-семинара "Распределенные и кластерные вычисления". – Красноярск, 2006г. – С.79-89.
8. *Кучунова, Е.В.* Параллельная реализация алгоритма для расчета упругих волн в блочной среде / Е.В. Кучунова, В.М. Садовский // Труды Международной научной конференции Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2007). – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. – Т.2. – С.37-43.
9. *Кучунова, Е.В.* Численное решение прямой динамической задачи динамической теории упругости на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова // Сборник трудов XX международ. конф. ММТТ-20 в 10т., Т.1, секция 1 / под ред. В.С. Балакирева. Изд. Яросл. гос. техн. ун-т., Ярославль 2007. С.161-165.
10. *Кучунова, Е.В.* Численное исследование распространения сейсмических волн в блочных средах на многопроцессорных вычислительных системах / Е.В. Кучунова, В.М. Садовский // Труды Международной научной конференции "Параллельные Вычислительные Технологии" (Санкт-Петербург, 28 января - 1 февраля 2008г.). – Челябинск: Изд. ЮУрГУ, 2008. – С.130-141.