

Численное моделирование динамических процессов в неоднородных деформируемых средах

Программный комплекс и распараллеливание

Н.И. Хохлов, И.Б. Петров

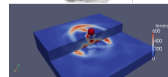
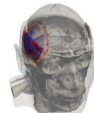
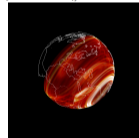
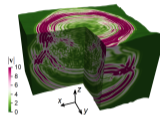
Московский физико-технический институт
национальный исследовательский университет

6 марта 2025 г.

Программный комплекс для численного моделирования волновых возмущений I

Области применения

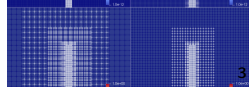
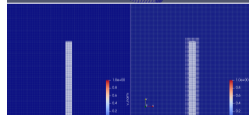
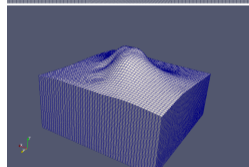
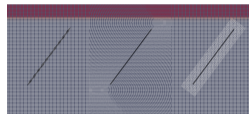
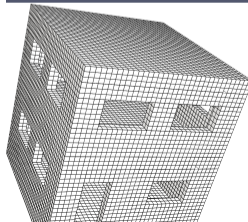
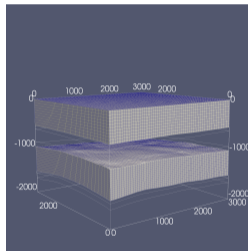
- прямая задача сейсморазведки, моделирование откликов от неоднородных структур трещиноватых пластов;
- моделирование динамических нагрузок, динамическая прочность материалов;
- задачи глобальной сейсмоки и геофизики, сейсмостойкость, моделирование распространения сейсмических волн от землетрясений;
- исследование моделей геологических сред, построение усредненных моделей геологических сред;
- другие динамические задачи МСС (УЗИ, неразрушающий контроль, и т.д.).



Программный комплекс для численного моделирования волновых возмущений II

Расчетные сетки

- структурированные прямолинейные, структурированные криволинейные сетки;
- блочные структурированные прямолинейные/криволинейные сетки;
- наложенные структурированные сетки;
- иерархические структурированные сетки.



Программный комплекс для численного моделирования волновых возмущений III

Численные методы и модели

- Модели сред
 - линейно-акустические, линейно-упругие, вязко-упругие, вязко-пластические;
 - флюидонасыщенные, пористые и др.
- Численные методы
 - сеточно-характеристические (1-4 порядка точности), бикompактные схемы (2-5 порядок точности);
 - конечно-объемные методы (TVD, WENO), конечно-разностные методы (FDTD).
- Особенности
 - явное выделение геологических неоднородностей (трещины, каверны, включения);
 - явное выделение границ раздела поверхностей, в том числе криволинейных;
 - учет топографии дневной поверхности;
 - разномасштабные среды.

Программный комплекс для численного моделирования волновых возмущений IV

- параллелизация расчётного алгоритма для работы на высокопроизводительных вычислительных системах (OpenMP, MPI, CUDA);
- большие расчетные сетки (более 1 млрд. узлов);
- задание произвольной системы наблюдений (наземная, скважинная, 2D и 3D);
- расчёт на плоской волне с одномоментным построением сейсмокуба;
- построение сейсмогеологических моделей по разнородным данным (sgy, рельеф, карты высот, разломы);
- монотонные схемы 1-4 порядка точности (всего более 30-ти схем);
- возможность явного задания произвольной структуры среды с явным выделением неоднородностей.

Программный комплекс для численного моделирования волновых возмущений V

Вычислительный модуль

Последовательный модуль
на трехмерных
структурных сетках

Параллельный модуль
на трехмерных
структурных сетках
(MPI/OpenMP)

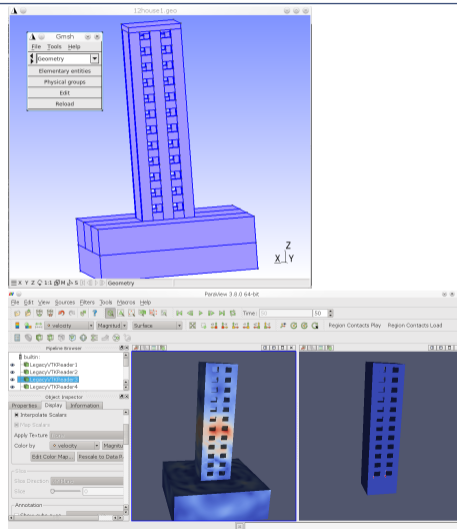
Преппроцессинг

Встроенная система
конфигурационных
файлов

Преппроцессинг
используя пакет
Gmsh

Постпроцессинг

Постпроцессинг
на основе
формата VTK
(ParaView,
Mayavi)

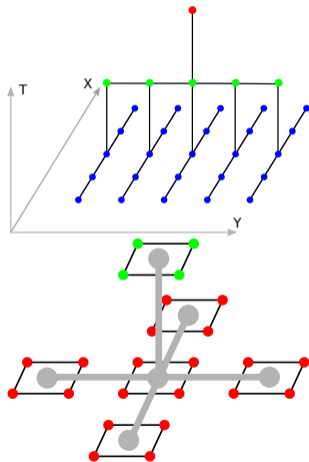


Распараллеливание

- Используемые технологии
 - низкоуровневая оптимизация, потоковые инструкции;
 - оптимизация работы с памятью, оптимизация работы циклов [Хуе, Strzodka, Grosser, Левченко] [Furgailo et al., 2019, Furgailo et al., 2021];
 - распараллеливание на системах в общей памяти (OpenMP) [Khokhlov et al., 2015];
 - распараллеливание на системах с распределенной памятью (MPI) [Fofanov and Khokhlov, 2020, Favorskaya et al., 2022, Khokhlov et al., 2015, Petrov and Khokhlov, 2014, Mitskovets et al., 2024, Khokhlov et al., 2016];
 - использование графических сопроцессоров (CUDA/OpenCL) [Ivanov and Khokhlov, 2018, Ivanov and Khokhlov, 2019].
- Разработаны и предложены алгоритмы декомпозиции многоблочных сеток.
- Проведено тестирование на числе ядер центрального процессора до 16 тыс.

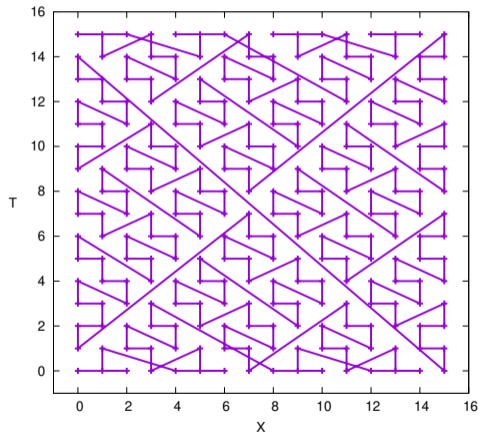
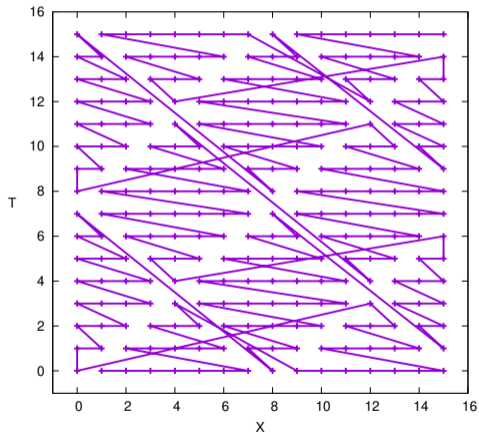
Однопоточная оптимизация

- использование инструкций SSE/AVX;
- оптимизация работы с памятью;
- оптимизация обхода циклов (тайлинг):
 - loop tiling [Panda, Bao etc.];
 - diamond/hexagonal tiling [Левченко, Grosser etc.];
 - hierarchical tiling [Carter, Zhou etc.].



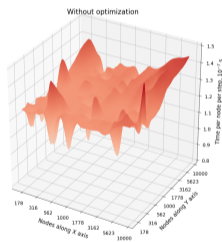
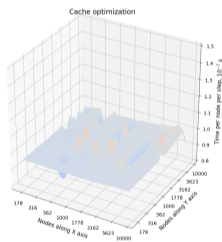
Однопоточная оптимизация

Пример одномерной задачи с тайлингом. Diamond и hierarchical тайлинг.



Однопоточная оптимизация

- наилучший результат дает обычный блочный подход;
- сложная форма тайла усложняет связь многоблочных сеток;
- достигнута производительность до 22% от пиковой, в реальных расчетах на уровне 10-15%.



Общая память: OpenMP

- два подхода к распараллеливанию: for и task;
- ускорение до 37 раз на 64 ядрах;
- task дает в ряде случаев более хорошие результаты при разномасштабном характере расчетных сеток;
- SYCL дает на 10-30 % лучший результат, чем OpenMP на достаточно больших сетках, но на маленьких проигрывает (вероятно оверхед от загрузки ядра).

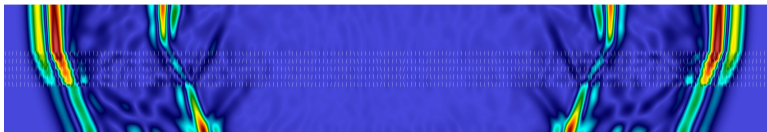


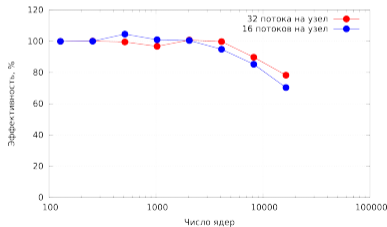
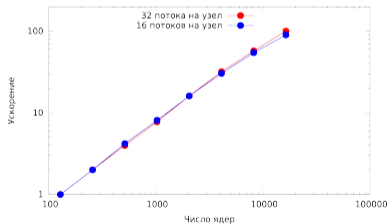
Рис.: 1001 расчетная сетка

GPU

- Переход от структуры массивов к массиву структур для хранения узлов расчетной сетки.
- Последовательное обращение к данным в памяти.
- Использование общей памяти графического процессора вместо глобальной памяти для хранения результатов промежуточных расчетов внутри блоков, на которые разрезается расчетная области.
- Удаление условных ветвлений внутри блоков из нитей исполнения.
- Синхронизация работы и пересылки данных между графическими процессорами без участия центрального процессора.
- Уменьшение объема потребляемой общей памяти GPU.
- Выбор размера блока вдоль оси X кратным размеру warp (группы нитей).
- Итоговое ускорение до 55 раз на одном устройстве.
- На 8 картах ускорение до 7 раз по сравнению с одной.

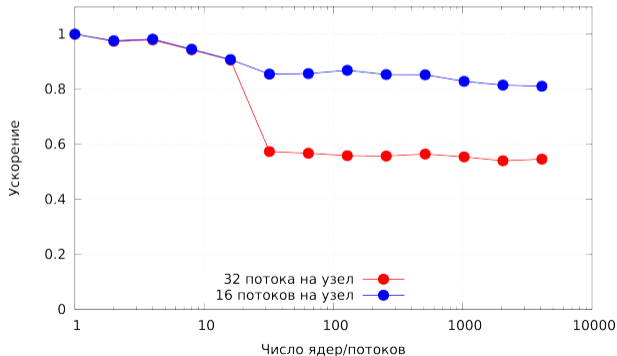
Распараллеливание MPI: strong scalability

- размер сетки 1000x1000x1000;
- число ядер от 128 до 16384;
- 16-ти ядерные процессоры AMD Opteron 2.3GHz;
- ускорение до 100 раз, эффективность до 80 %.



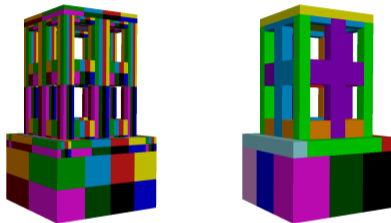
Распараллеливание MPI: weak scalability

- размер сетки на ядро – 16 млн. узлов;
- число ядер до 4096;
- максимальный размер сетки – 62 млрд. узлов;
- ускорение до 0.8 и 0.55.



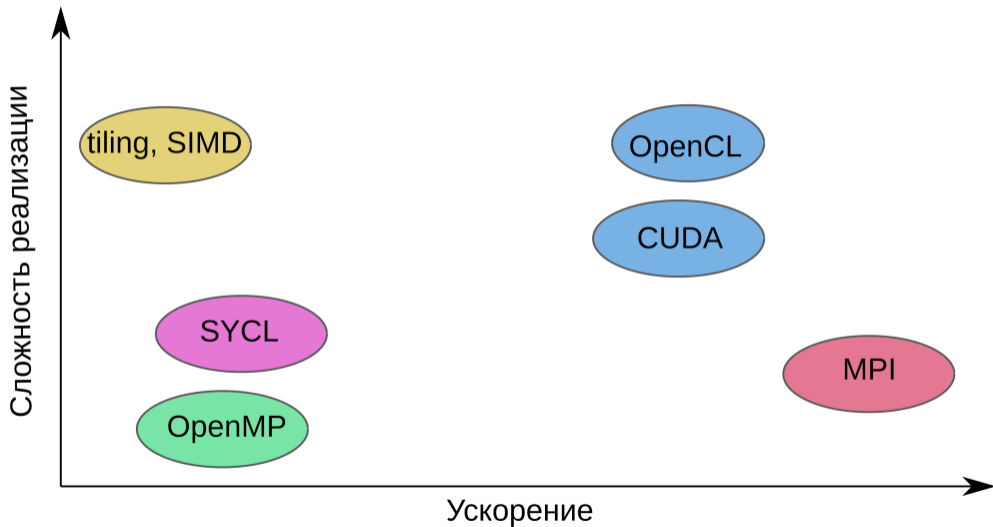
Распараллеливание MPI

- предложен алгоритм декомпозиции многоблочных сеток;



- уменьшен объем пересылок;
- сильно зависит от задачи;
- декомпозиция разномасштабных сеток для трещиноватых сред (1000-10000 сеток).

Сравнительный анализ технологий



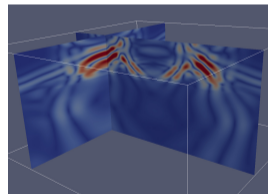
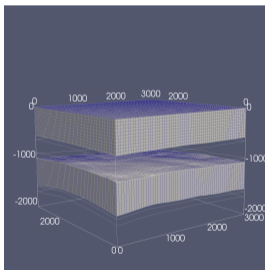
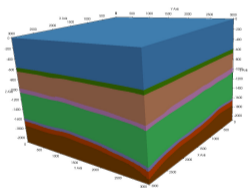
Общее заключение по распараллеливанию

- в реальных расчетах используется OpenMP + MPI;
- для других технологий сложно поддерживать код;
- многоблочные сетки + MPI пока не дает желаемого результата;
- чем лучше оптимизирован алгоритм, тем сложнее параллелить;
- время расчета одного узла плавают из-за данных;
- расчеты до 1-2 млрд. узлов считаются на одном узле примерно за сутки.

Численное решение задач распространения динамических возмущений с явным выделением криволинейных границ I

- Результаты применения разработанного в работе метода моделирования сейсмических волн в геологических средах с произвольными границами раздела к участку слоистой среды.
- Участок расположен на северо-востоке Европейской части Российской Федерации на территории Архангельской области.
- Модель имеет 8 слоев, каждый из которых обозначен отдельным цветом (расчет на 2000 ядер).
- Две постановки: явное деление границ и сквозной счет.

Численное решение задач распространения динамических возмущений с явным выделением криволинейных границ II



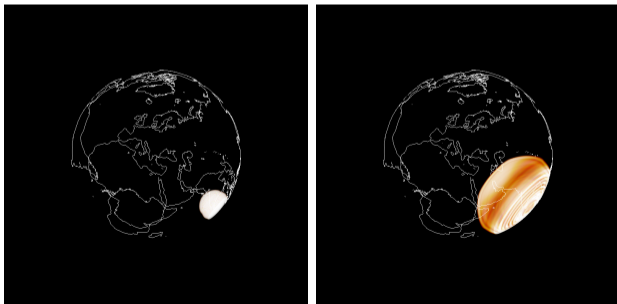
Численное решение задач распространения динамических возмущений с явным выделением криволинейных границ III

- Сравнение метода с явным выделением границ и сквозного счёта;
- Время расчёта (2 000 ядер) – 815 и 7415 с;
- Использованная память – 21,7 и 47,5 ГБ;
- Разница в максимальной амплитуде 1 отражения (V_z) – 22 %;
- Разница в максимальной амплитуде 2 отражения (V_z) – 26 %;
- Разница в максимальной амплитуде 3 отражения (V_z) – 30 %.

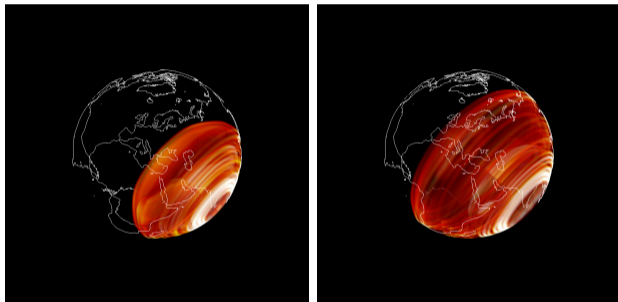
Приведённый метод полноволнового моделирования процесса сейсмической разведки является более точным способом генерации синтетических сейсмограмм в условиях геологического массива с границами слоёв произвольной формы

Решение задач глобальной сейсмологии I

- Модель планеты Земля PREM [Dziewonski, 1981].
- Верификация на основе экспериментальных данных.
- Верификация на основе сторонних расчетов [Toro, 2005].
- Трехмерная модель, расчет на 1000 ядрах.
- Трехмерная визуализация на кластере.

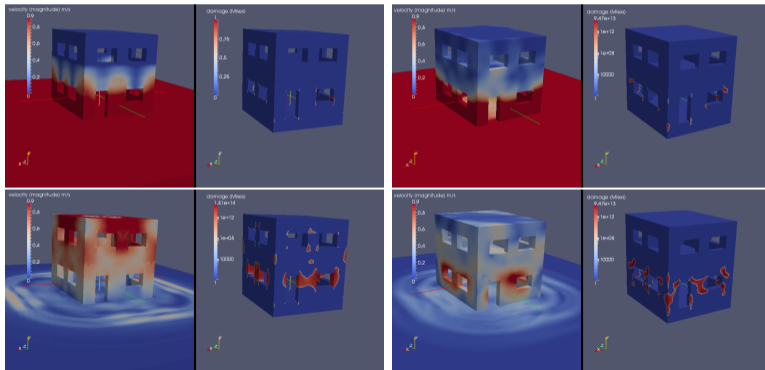


Решение задач глобальной сейсмологии II

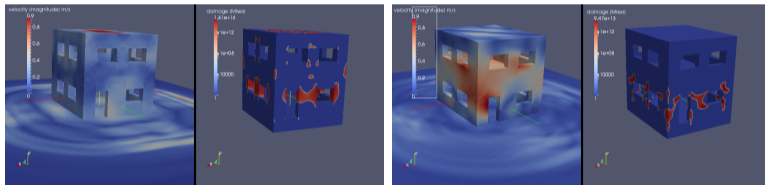


Пример. Сейсмостойкость, многоблочные сетки I

Слева – продольная, справа – поперечная.

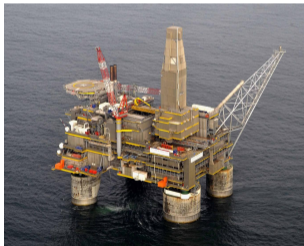


Пример. Сейсмостойкость, многоблочные сетки II

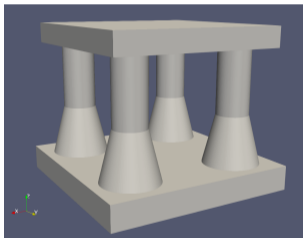
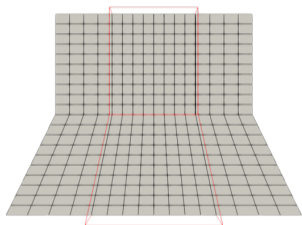


Пример 4. Динамическое воздействие на сложные сооружения I

Морская стационарная платформа гравитационного типа “Пильтун-Астохская-Б”.



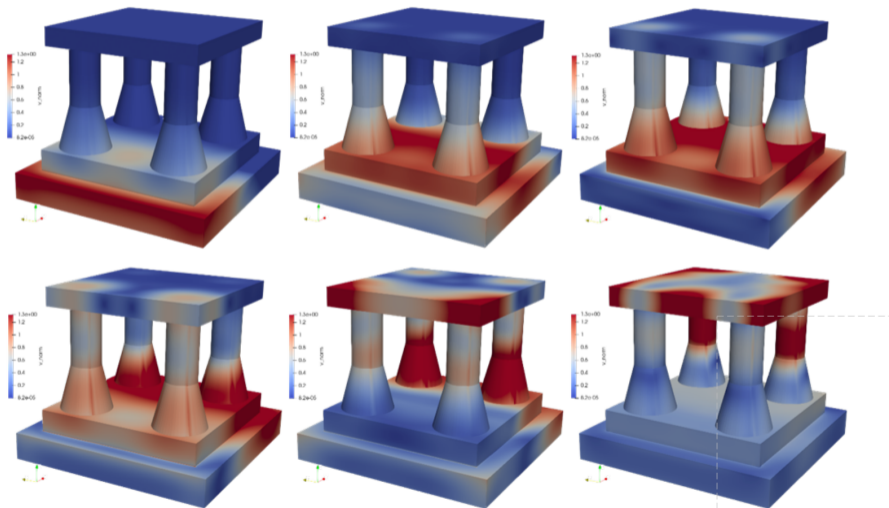
Пример 4. Динамическое воздействие на сложные сооружения II



Пример 4. Динамическое воздействие на сложные сооружения III

Подземный толчок

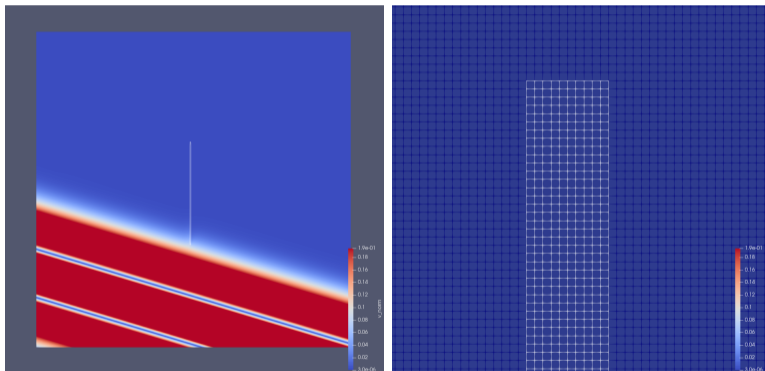
Пример 4. Динамическое воздействие на сложные сооружения IV



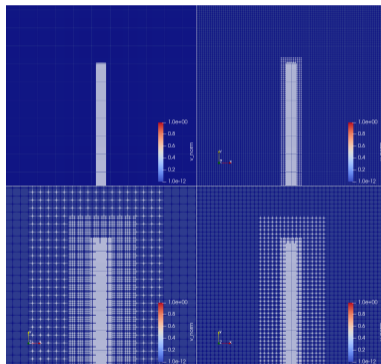
Пример 5. Точный расчет во флюидонасыщенной трещине I

- Флюидонасыщенная трещина с раскрытием 1:100.
- Прохождение фронта упругой волны.
- Иерархические сетки, по времени и пространству.
- Три уровня иерархии – ускорение в 80 раз.

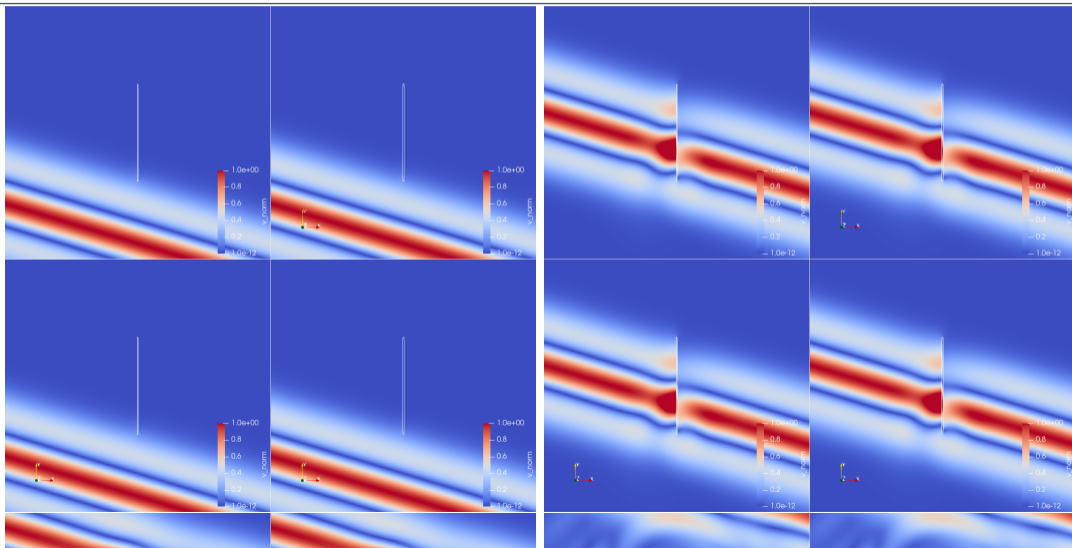
Пример 5. Точный расчет во флюидонасыщенной трещине II



Пример 5. Точный расчет во флюидонасыщенной трещине III



Пример 5. Точный расчет во флюидонасыщенной трещине IV



Спасибо! Вопросы?

Список литературы I



Favorskaya, A., Khokhlov, N., Sagan, V., and Podlesnykh, D. (2022).

Parallel Computations by the Grid-Characteristic Method on Chimera Computational Grids in 3D Problems of Railway Non-destructive Testing.

pages 199–213.



Fofanov, V. and Khokhlov, N. (2020).

Optimization of Load Balancing Algorithms in Parallel Modeling of Objects Using a Large Number of Grids.

pages 63–73.



Furgailo, V., Elchinov, E., and Khokhlov, N. (2021).

RESEARCH OF IMPROVING THE PERFORMANCE OF EXPLICIT NUMERICAL METHODS ON THE X86 AND ARM CPU.

In *9th International Conference "Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education*

, pages 236–240. Crossref.

Список литературы II



Furgailo, V., Ivanov, A., and Khokhlov, N. (2019).

Research of Techniques to Improve the Performance of Explicit Numerical Methods on the CPU. In *2019 Ivannikov Memorial Workshop (IVMEM)*, pages 79–85. IEEE.



Ivanov, A. M. and Khokhlov, N. I. (2018).

Parallel implementation of the grid-characteristic method in the case of explicit contact boundaries. *Computer Research and Modeling*, 10(5):667–678.



Ivanov, A. M. and Khokhlov, N. I. (2019).

Efficient Inter-process Communication in Parallel Implementation of Grid-Characteristic Method. pages 91–102.



Khokhlov, N., Ivanov, A., Zhdanov, M., Petrov, I., and Ryabinkin, E. (2016).

Applying OpenCL technology for modelling seismic processes using grid-characteristic methods, volume 678.

Список литературы III



Khokhlov, N., Yavich, N., Malovichko, M., and Petrov, I. (2015).
Solution of Large-scale Seismic Modeling Problems.
In *Procedia Computer Science*, volume 66, pages 191–199.



Mitskovets, I., Sagan, V., and Khokhlov, N. (2024).
Parallel Modeling of Elastic Wave Propagation, with Explicit Pore Delineation Using Overset Grids Method.
Physics of Particles and Nuclei, 55(3):516–518.



Petrov, I. B. and Khokhlov, N. I. (2014).
Modeling 3D seismic problems using high-performance computing systems.
Mathematical Models and Computer Simulations, 6(4):342–350.