

Практика использования суперкомпьютеров в решении трехмерных задач электромагнитной геофизики методом интегральных уравнений

Кругляков М.С.¹

Коротаев С.М.²

Орехова Д.А.³

Щорс Ю.Г.⁴

¹ВМК МГУ

²ЦГЭМИ ИФЗ РАН

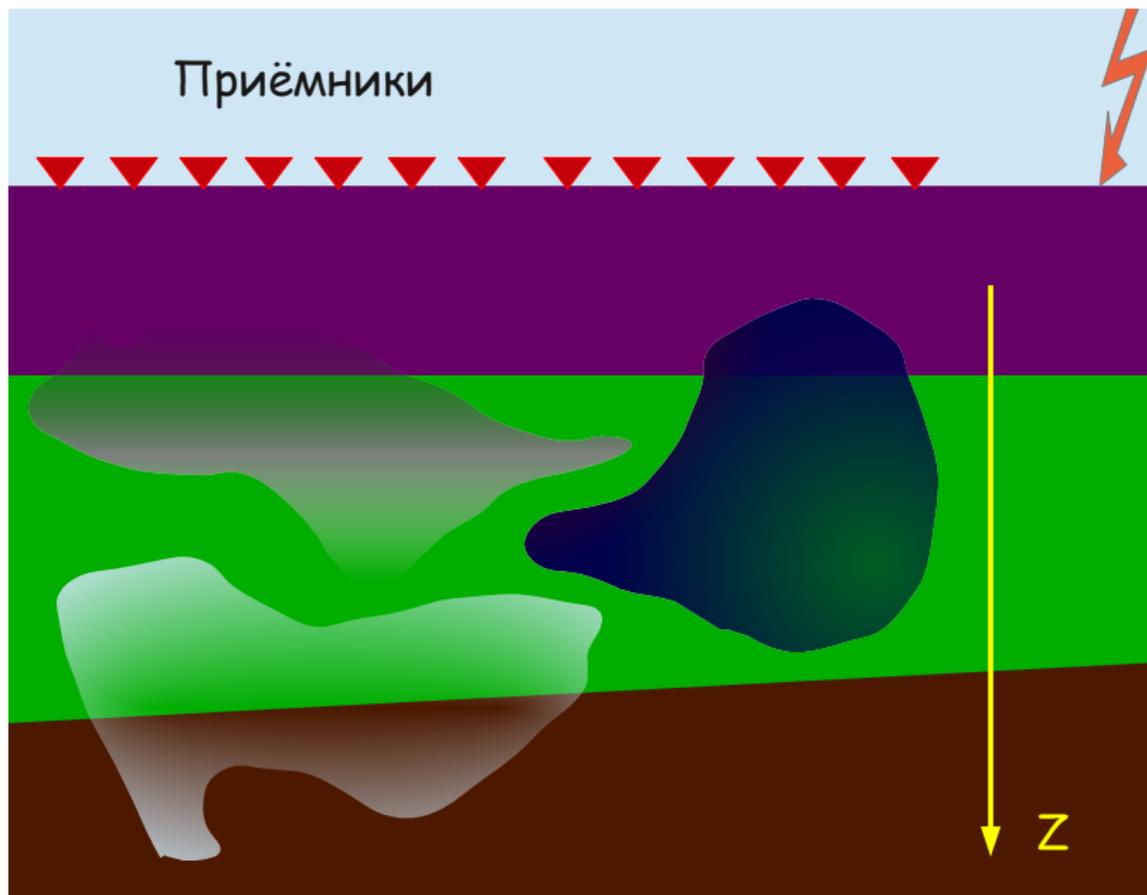
³ИФЗ РАН

⁴НИЦ “Курчатовский Институт”

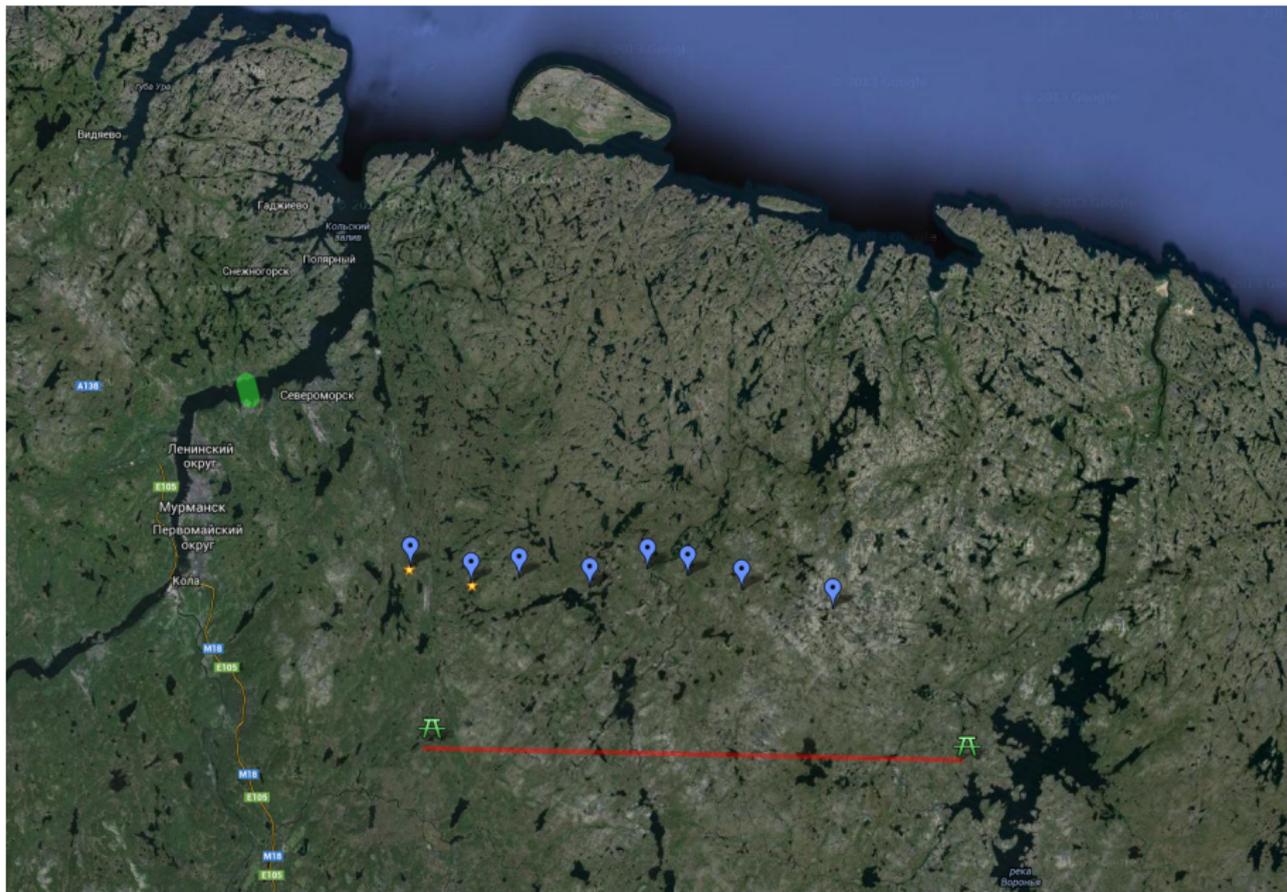
2013

10 APR 10

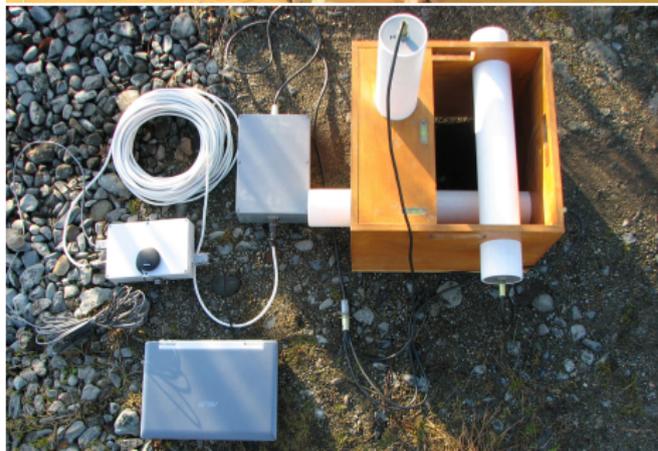
Электромагнитное зондирование



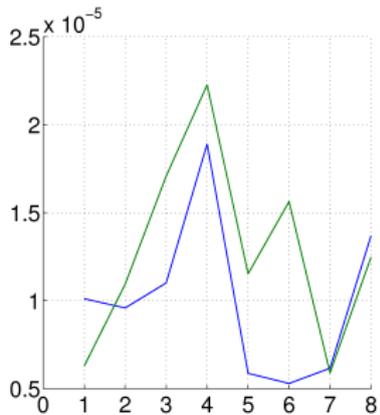
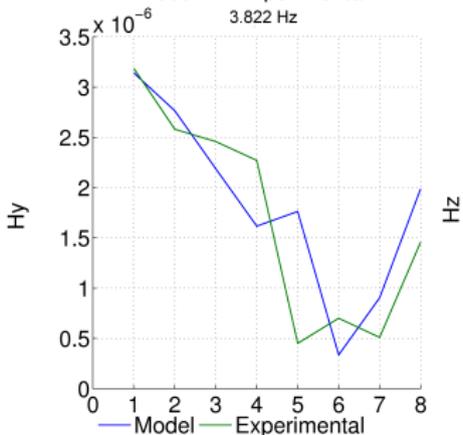
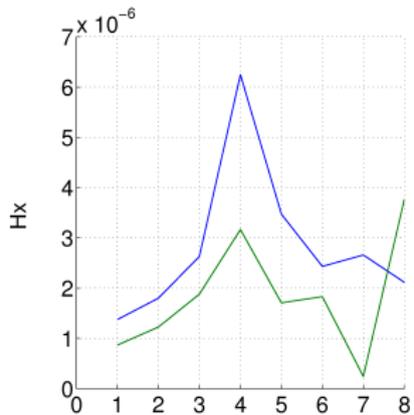
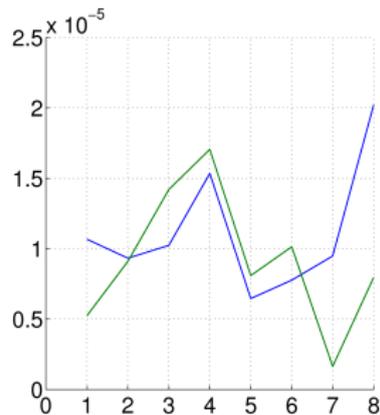
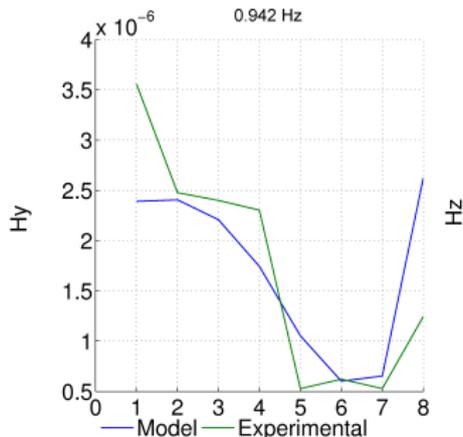
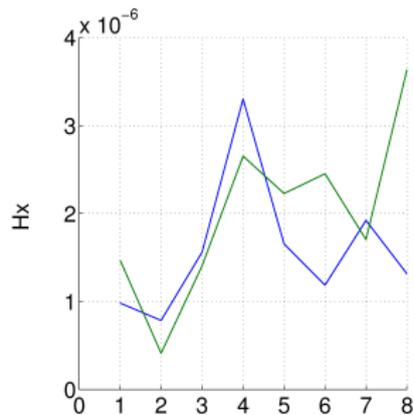
Район эксперимента



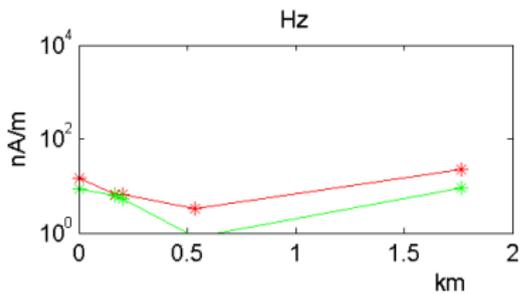
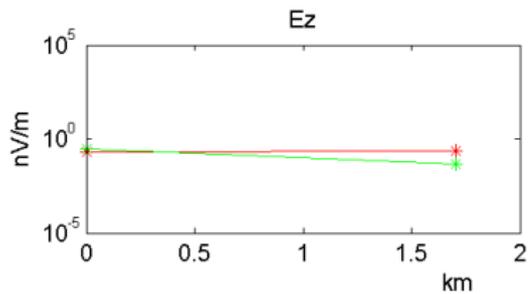
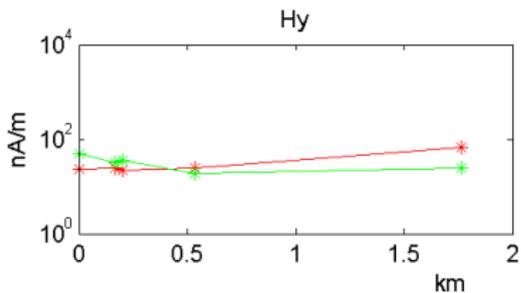
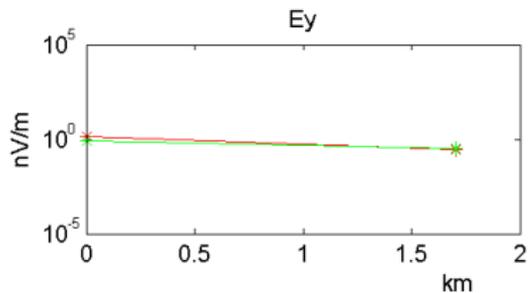
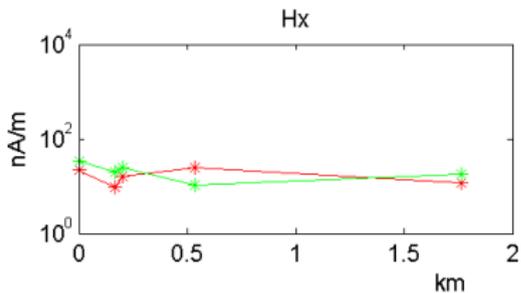
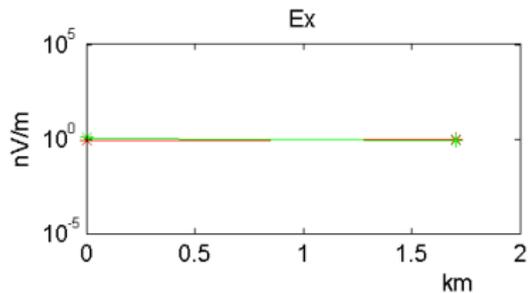
Источник и приемники



Сухопутный эксперимент



Морской эксперимент



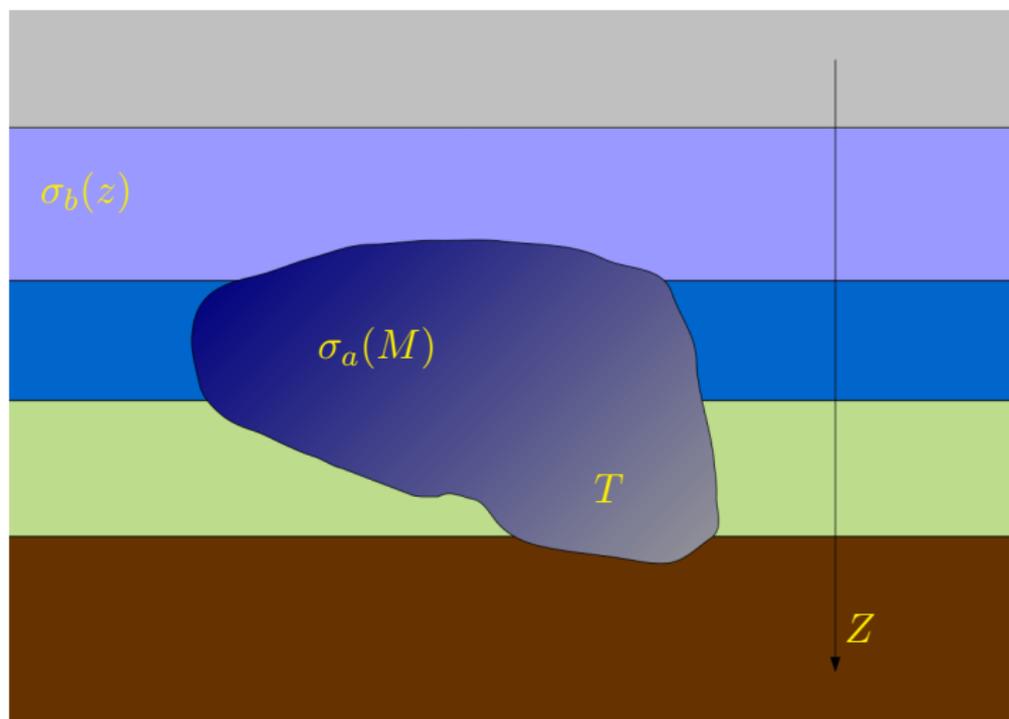
Работает. Но почему так медленно?

- Специфика исходной задачи?
- Плох вычислительный метод — интегральные уравнения?
- Неудачная программная реализация — P1E3D?



«Нет ничего практичнее хорошей теории!»
Р. Куртгоф

Типовая геофизическая модель



$$\gamma = \frac{\max(\sigma_a, \sigma_b)}{\min(\sigma_a, \sigma_b)} \geq 10^4 \quad (1)$$

Немного формальной математики

$$\begin{cases} \mathbf{rot} \mathbf{H} = \sigma \mathbf{E} + \mathbf{j}_{\text{ext}} \\ \mathbf{rot} \mathbf{E} = i\omega\mu_0 \mathbf{H} \end{cases} \quad (2)$$

Непрерывность тангенциальных компонент ЭМ поля

Условия излучения на бесконечности

- Трехмерное распределение проводимости σ задает линейный оператор \mathbf{W}^{-1} , переводящий \mathbf{j}_{ext} в \mathbf{E} .
- Формальная контрастность γ связана со спектральными свойствами оператора \mathbf{W}^{-1} .

Спектр и контрастность

- $\sigma_a \gg \sigma_b$, тогда:

$$\begin{aligned}\|\mathbf{W}\| &< \gamma + \frac{1}{\gamma} \\ \|\mathbf{W}^{-1}\| &< 1\end{aligned}\tag{3}$$

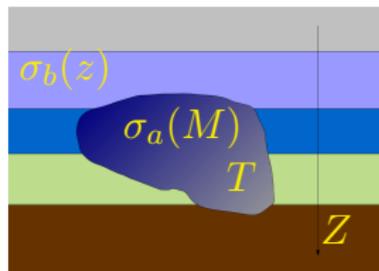
- $\sigma_a \ll \sigma_b$, тогда:

$$\begin{aligned}\|\mathbf{W}\| &< 1 - \frac{1}{\gamma} \\ \|\mathbf{W}^{-1}\| &< \gamma + 1\end{aligned}\tag{4}$$

Таким образом для $\gamma \gg 1$ получаем:

$$\mathbf{cond}(W) = \|\mathbf{W}\| \|\mathbf{W}^{-1}\| < \gamma + \frac{1}{\gamma}\tag{5}$$

Интегральные уравнения



$$\mathbf{E}(M) = \int_T \widehat{G}_E(M, M_0) \Delta_\sigma(M_0) \mathbf{E}(M_0) dT_{M_0} + \mathbf{E}^0(M)$$

$$\mathbf{H}(M) = \int_T \widehat{G}_H(M, M_0) \Delta_\sigma(M_0) \mathbf{E}(M_0) dT_{M_0} + \mathbf{H}^0(M) \quad (6)$$

$$\Delta_\sigma(M_0) = \sigma_a(M_0) - \sigma_b(M_0)$$

Метод интегральных средних

$$\mathbf{E}_n + \frac{1}{V_n} \sum_{k=1}^N \int_{T_n} \int_{T_k} \widehat{G}_E(M, M_0) \Delta_\sigma(M_0) \mathbf{E}(M_0) dT_{M_0} dT_M = \mathbf{E}_n^0 \quad (7)$$

$$\mathbf{U}_n - \sum_{k=1}^N \widehat{K}_n^k \mathbf{U}_k = \widetilde{\mathbf{E}}_n^0, \quad (8)$$

где

$$\widehat{K}_n^k = \frac{1}{V_n} \int_{T_k} \int_{T_n} \widehat{G}_E(M, M_0) \Delta_\sigma(M_0) dT_M dT_{M_0} \quad (9)$$

Число обусловленности СЛАУ

Теорема

Если $\infty > \sigma_a(M), \sigma_b(M) > 0, M \in T$, то для матрицы A системы (10)

$$\mathbf{U}_n - \sum_{k=1}^N \hat{K}_n^k \mathbf{U}_k = \tilde{\mathbf{E}}_n^0 \quad (10)$$

справедливы следующие неравенства:

$$\begin{aligned} \mathbf{cond}_2 A &< \gamma + \frac{1}{\gamma} \\ \mathbf{cond}_F A &< N \left(\gamma + \frac{1}{\gamma} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

Как посчитать коэффициенты?

$$\int_a^{a+h_y} \int_b^{b+h_y} \int_c^{c+h_x} \int_d^{d+h_x} \left\{ \int_0^\infty J_{0,1}(\lambda\rho) f(\lambda) d\lambda \right\} dx dx_0 dy dy_0, \quad (12)$$
$$\rho = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}.$$

Проблема хранения плотной матрицы

Главная беда интегральных уравнений.

- Что бы разместить всю матрицу в памяти нам потребуется хранить $9N_x^2 N_y^2 N_z^2$ комплексных чисел.
- При $N_x = 100$, $N_y = 100$, $N_z = 10$ и одинарной точности нужно примерно 670 Гб.
- А если у нас двойная точность и хотя бы миллион ячеек?
- При $N_x = 100$, $N_y = 100$, $N_z = 100$ и двойной точности нужно примерно 131 Тб.

Можно ли с этим что-то сделать?

Компактное хранение

$$\widehat{G}_E(M, M_0) = \widehat{G}_E(x - x_0, y - y_0, z, z_0) \quad (13)$$

Если размер сетки по X и Y постоянен, то:

$$\widehat{Q}_n^k = \frac{1}{V_n} \int_{T_k} \int_{T_n} \widehat{G}_E(M, M_0) = \widehat{Q}_n^k \left(I_x^n - I_x^k, I_y^n - I_y^k, I_z^n, I_z^k \right), \quad (14)$$

где $I_x^{n,k} = 1 \dots N_x$, $I_y^{n,k} = 1 \dots N_y$, $I_z^{n,k} = 1 \dots N_z$.

В этом случае наша плотная матрица A принимает вид

$$A = I + QD, \quad (15)$$

где

- I, D — диагональные матрицы.
- Q — блочно-теплицева матрица (14).
- При таком хранении потребность в памяти составит $4 \cdot 6 \cdot 16 \cdot N_x N_y N_z^2 + O(N_x N_y N_z)$ байт для двойной точности.
- При $N_x = 100, N_y = 100, N_z = 100$ это примерно 36 Гб.

Как быстро умножать?

- Основа любого итерационного метода — умножение матрицы на вектор
- Быстрое вычисление свертки — двойное дискретное преобразование Фурье
 - ▶ Делаем двойное преобразование Фурье по “горизонтали”
 - ▶ Умножаем $2N_x N_y$ различных матриц порядка N_z на $3N_x N_y$ векторов длины N_z
 - ▶ Делаем обратное преобразование Фурье по “горизонтали”
- Не будем изобретать плохой велосипед и возьмем `fftw3`

Распределенное хранение матрицы

				Процесс
$Q_n^k(0, 0)$	$Q_n^k(0, 1)$...	$Q_n^k(0, 2N_x - 1)$	0
$Q_n^k(1, 0)$	$Q_n^k(1, 1)$...	$Q_n^k(1, 2N_x - 1)$	1
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
$Q_n^k(2N_y - 1, 0)$	$Q_n^k(2N_y - 1, 1)$...	$Q_n^k(2N_y - 1, 2N_x - 1)$	$2N_y - 1$

- Каждый блок $Q_n^k(I, J)$ — 6 матриц $N_z \times N_z$
- Все матрицы порядка N_z , относящиеся к одному MPI-процессу, можно независимо умножать на соответствующие вектора

Итерационный метод

- Метод простой итерации: реализовать просто, но сходится чудовищно медленно — $\left(1 - \frac{1}{\gamma}\right)^n$
- Flexible GMRES: сходится хорошо и есть хорошая распределенная реализация.

Особенности реализации GIEM2G

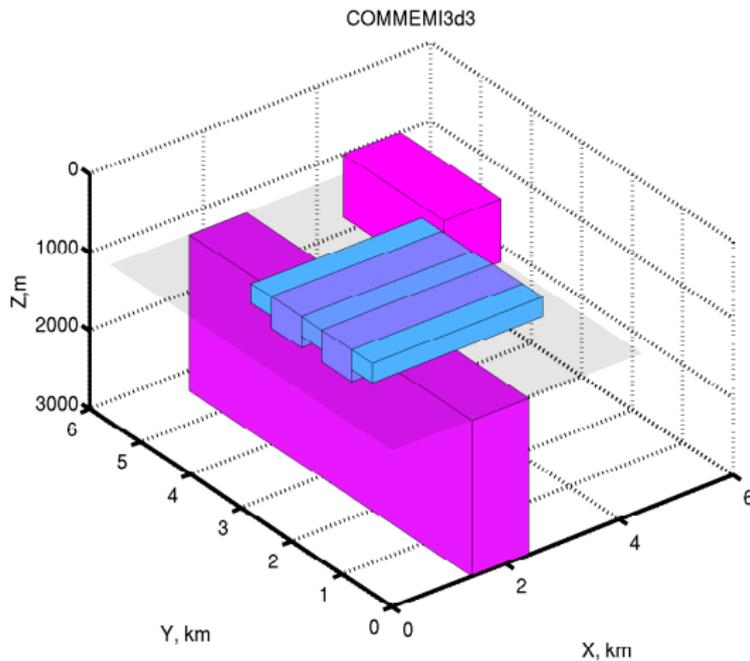
- Матрица хранится по блокам, как в распределенной реализации fftw3
- Вычисление коэффициентов осуществляется собственным специальным алгоритмом
- Умножение матрицы на вектор: fftw3 и OpenBlas
- Итерационный метод FGMRES от V. Frayss, L. Giraud, S. Gratton, J. Langou <http://www.cerfacs.fr>
- Гибридная схема MPI+OpenMP

«Теория - конечно, хорошая вещь, но вычислительный эксперимент остается навсегда!»

почти П.Л. Капица

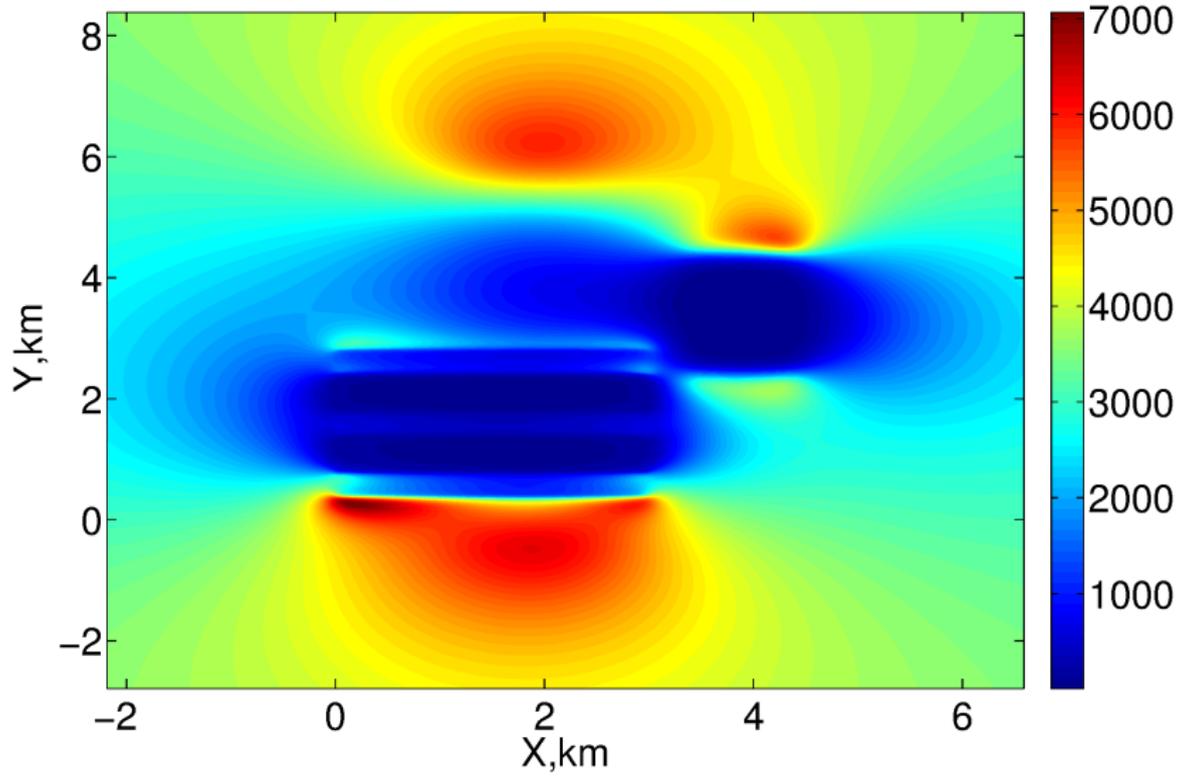


Тестовая модель



Слоистая среда		
	Сопротивление	Толщина
1	10^3 Ом·м	1000 м
2	10^4 Ом·м	6500 м
3	10	∞

ρ_{yx}



$$N_x = 88, N_y = 112, N_z = 59$$

224 процесса, 72 МБ на процесс

Время счета на “Ломоносове”, секунды

Расчет коэффициентов				
Процессов на узел	Нитей на процесс			
	1	2	4	8
1	75	42	30	22
2	75	46	33	
4	76	56		
8	100			
BG/p	145			
Одна “итерация”				
1	0.021	0.021	0.019	0.019
2	0.032	0.028	0.026	
4	0.052	0.049		
8	0.081			
BG/p	0.06			

$N_x = 176$, $N_y = 224$, $N_z = 118$
 448 процессов, 574 МБ на процесс
 Время счета на “Ломоносове”, секунды

Расчет коэффициентов				
Процессов на узел	Нитей на процесс			
	1	2	4	8
1	520	270	200	190
2	525	390	320	
4	700	650		
8	1220			
BG/p	950			
Одна “итерация”				
1	0.14	0.1	0.09	0.07
2	0.18	0.12	0.1	
4	0.22	0.2		
8	0.46			
BG/p	0.25			

Сходимость

Время счета, секунды

Модель	GIEM2G		PIE3D	
	E_x	E_y	E_x	E_y
1	60 – 260	62 – 270	1000	1200
2	415 – 2700	437 – 2840	метод не сошелся	

Заключение

- Плохая обусловленность высоко-контрастных задач имеет физическую природу.
- Использование интегральных уравнений позволяет её не испортить.
- Реализован распределенный алгоритм, позволяющий решать интегральные уравнения на суперкомпьютерах за разумное время.
- В настоящее время использование интегральных уравнений в ЭМ геофизике является практически осмысленным, особенно для высоко-контрастных случаев.