

УДК 519.6

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ КОЭФФИЦИЕНТА ФИЛЬТРАЦИИ НА ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

А. В. Елесин¹, А. Ш. Кадырова¹

Рассматривается модельная задача идентификации коэффициента фильтрации по известным значениям напора в наблюдательных точках. Решение задачи требует больших вычислительных затрат, которые можно существенно сократить за счет использования гетерогенных вычислительных систем.

Ключевые слова: минимизация функции невязки, обратная задача, параллельные алгоритмы, гетерогенные вычислительные системы.

1. Введение. Рассматривается задача идентификации коэффициента фильтрации трехмерного анизотропного напорного водоносного пласта по известным значениям напора в наблюдательных точках. Задача идентификации коэффициента фильтрации относится к классу обратных коэффициентных задач и возникает на этапе адаптации геолого-гидродинамической модели изучаемого объекта по имеющимся данным. Одним из методов решения этой задачи является определение идентифицируемых параметров из минимума функции невязки, имеющей вид суммы квадратов разности между известными и вычисленными значениями напора в наблюдательных точках. При решении реальных задач идентификации коэффициента фильтрации число известных значений напора всегда ограничено, что накладывает ограничение на число идентифицируемых параметров. Для уменьшения числа идентифицируемых параметров используются различные подходы [1, 2]: метод разбиения на зоны, конечно-элементное представление, аппроксимация с помощью сплайна, полиномиальный метод и др. В данной работе коэффициент фильтрации представляется в виде кусочно-постоянной функции. Функция невязки, как правило, имеет овражную структуру, и для ее минимизации часто используются различные варианты метода Левенберга–Марквардта [1–6].

В настоящей статье минимизация функции невязки проводится двухшаговым методом Левенберга–Марквардта [7]. Основные идеи построения двухшаговых методов изложены в работе [8]. В этих методах первый шаг каждой итерации проводится по алгоритмам классических методов, но допускается увеличение функции невязки. Итоговые же значения функции невязки на итерациях, как и в классических методах, образуют убывающую последовательность.

Решение задачи идентификации коэффициента фильтрации требует больших вычислительных затрат, так как на каждой итерации процесса минимизации функции невязки требуется многократно решать системы линейных алгебраических уравнений большой размерности. Эти затраты можно существенно сократить за счет использования параллельных вычислений. В данной работе предлагаются новые схемы численного решения задачи идентификации коэффициента фильтрации на гетерогенных вычислительных системах с распараллеливанием вычислений по процессам, по потокам и с использованием графических вычислительных устройств.

2. Задача идентификации коэффициента фильтрации. Идентификация коэффициента фильтрации проводится в условиях стационарной однофазной фильтрации жидкости, подчиняющейся закону Дарси. Уравнение фильтрации для пласта имеет вид [9]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xy} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{xy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0, \quad (1)$$

где $h = h(x, y, z)$ — напор, $K_{xy} = K_{xy}(x, y, z)$, $K_z = K_z(x, y, z)$ — коэффициенты фильтрации. На границе пласта задаются граничные условия первого и второго рода. Коэффициент фильтрации представляется в виде кусочно-постоянной функции.

Область решения задачи Ω разбивается на зоны однородности Ω_k : $\bigcup_{k=1}^{n_z} \Omega_k = \Omega$, где n_z — число зон однородности. Каждая из зон однородности характеризуется двумя значениями коэффициента фильтра-

¹ Институт механики и машиностроения КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, 2/31, 420111, Казань; А. В. Елесин, ст. науч. сотр., e-mail: elesin@mail.knc.ru, А. Ш. Кадырова, науч. сотр., e-mail: kadyrova@mail.knc.ru

ции: $K_{xy} = K_{xy}(x, y, z) = \sum_{k=1}^{n_z} K_{xyk} \varphi_k(x, y, z)$, $K_z = K_z(x, y, z) = \sum_{k=1}^{n_z} K_{zk} \varphi_k(x, y, z)$, где $\varphi_k(x, y, z) = 1$ на Ω_k и $\varphi_k(x, y, z) = 0$ вне Ω_k .

Значения коэффициента фильтрации определяются в процессе минимизации функции невязки

$$J(K) = \frac{1}{2} R^T R, \quad (2)$$

где $K = \{K_i\}_{i=1}^N = \{\ln K_{xyi}, \ln K_{zi}\}_{i=1}^{n_z}$ — логарифмы идентифицируемых значений коэффициента фильтрации, $N = 2n_z$ — число идентифицируемых параметров, $R^T = (h_1 - h_1^{tr}, \dots, h_M - h_M^{tr})$ — вектор невязки, $h_j = h_j(K)$ и h_j^{tr} — вычисленные и заданные значения напора в наблюдательных точках, M — число наблюдательных точек.

Для численного решения уравнения фильтрации (1) пласт разбивается на прямоугольные параллелепипеды (блоки). Затем методом контрольных объемов [10] уравнение (1) с соответствующими граничными условиями преобразуется в систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Число уравнений системы совпадает с общим числом блоков. Полученная система решается методом сопряженных градиентов с различным предобуславливанием: диагональное масштабирование (DS), неполное разложение Холецкого (IC) [11], полиномиальное предобуславливание (POL) [12].

В работе решается модельная задача идентификации коэффициента фильтрации. При построении модельной задачи из решения уравнения фильтрации (1) при заданных значениях коэффициента фильтрации K_{xyi}^{tr} и K_{zi}^{tr} ($i = 1, \dots, n_z$) определялись значения напора в наблюдательных точках h_j^{tr} , $j = 1, \dots, M$. Затем по значениям напора h_j^{tr} восстанавливались значения коэффициента фильтрации K_{xyi} , K_{zi} в зонах однородности.

3. Двухшаговый метод Левенберга–Марквардта минимизации функции невязки. В методе Левенберга–Марквардта (ЛМ) новые значения параметров на каждой итерации определяются по формуле $K^n = K^{n-1} - (H + \mu_n E)^{-1} g$, где E — единичная матрица, $H = A^T A$ — приближенная матрица вторых производных, $A = \left\{ \frac{\partial h_j}{\partial K_i} \right\}$ — матрица чувствительности, g — градиент функции невязки, μ_n — параметр Марквардта, n — номер итерации. Начальное значение параметра Марквардта выбирается на порядок больше максимального сингулярного числа матрицы H . В случае уменьшения функции невязки на текущей итерации $J(K^n) < J(K^{n-1})$ параметр Марквардта уменьшается в два раза, в случае нарушения условия убывания параметр Марквардта увеличивается в два раза до тех пор, пока это условие не выполнится. На основе этого метода в [7] предложен двухшаговый метод Левенберга–Марквардта (ДЛМ). В методе ДЛМ используется главная система координат, полученная с помощью сингулярного разложения $H = V \Sigma V^T$, где V — ортогональная матрица, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ — диагональная матрица, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_N > 0$ — сингулярные числа.

Направления минимизации в главной системе координат условно делятся на две группы: направления, соответствующие большим сингулярным числам, и направления, соответствующие маленьким сингулярным числам. На первом шаге метода ДЛМ допускается увеличение функции невязки за счет ее увеличения в направлениях с большими сингулярными числами. Вдоль этих направлений проводится смещение параметров на втором шаге. На каждой итерации метода ДЛМ проводятся следующие действия.

1. Проверяется условие $J(K^{n-1} + d^1) < J(K^{n-1})$, где $d^1 = -(H + \mu_n E)^{-1} g$. Если оно выполняется, то $K^n = K^{n-1} + d^1$, $\mu_{n+1} = \mu_n/2$ и итерация заканчивается, иначе выполняется пункт 2.

2. Проверяется условие $J(K^{n-1} + d^1 + d^2) < J(K^{n-1})$, где $d^2 = V \tilde{d}_V$, \tilde{d}_V — вектор с компонентами $\tilde{d}_{V_i} = -\frac{\tilde{g}_{V_i}}{\sigma_i + \mu_n}$, $i = 1, \dots, q$, $\tilde{d}_{V_i} = 0$, $i = q + 1, \dots, N$, \tilde{g}_{V_i} — компоненты вектора $\tilde{g}_V = V^T \tilde{g}$, $\tilde{g} = A^T \tilde{R}$, \tilde{R} — вектор невязок в точке $K^{n-1} + d^1$, номер оси q выбирается из условия $\sigma_q > \mu_n \geq \sigma_{q+1}$. Если оно выполняется, то $K^n = K^{n-1} + d^1 + d^2$, $\mu_{n+1} = \mu_n/2$ и итерация заканчивается. В противном случае $\mu_n = 2\mu_n$ и повторяется пункт 1.

Остановка процесса минимизации проводится по достижении заданной точности ε по невязкам: $r_{\max} = \max_j |h_j - h_j^{tr}| < \varepsilon$.

Отметим, что для определения вектора d^1 используются значения невязок в точке K^{n-1} , а для определения вектора d^2 — значения невязок в точке $K^{n-1} + d^1$. В обоих случаях используется матрица чувствительности A , вычисленная в точке K^{n-1} , что позволяет существенно сократить вычислительные затраты.

Для вычисления элементов матрицы чувствительности можно использовать метод конечно-разностных соотношений, метод прямого дифференцирования, вариационный метод [1, 2]. В данной работе применяется метод прямого дифференцирования, при использовании которого на каждой итерации необ-

ходимо решать уравнение фильтрации (1) и N уравнений, полученных прямым дифференцированием уравнения (1). Отметим, что СЛАУ, полученные для каждой из этих задач, отличаются лишь правой частью, тогда как матрицы систем одинаковые.

4. Модельная задача идентификации коэффициента фильтрации. Модельная задача построена для пласта (4.8 км × 3.2 км × 150 м), состоящего из пяти слоев одинаковой толщины. На кровле пласта заданы граничные условия второго рода (меняются от 1.5×10^{-3} м/сут до 4.4×10^{-3} м/сут). Подошва и боковая поверхность пласта непроницаемы, за исключением боковой поверхности пятого слоя, на которой задан один участок с граничными условиями первого рода (80 м). Слои разбиты на зоны однородности (всего 80 зон однородности), каждая из которых характеризуется двумя значениями коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr} и K_{zk}^{tr} . Значения коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr} задавались из промежутка от 0.00177 м/сут до 30.8 м/сут, значения K_{zk}^{tr} — из промежутка от 0.0000177 м/сут до 0.308 м/сут. В каждой зоне однородности выбраны три наблюдательные точки (всего 240 наблюдательных точек).

Начальные значения коэффициента фильтрации $K_{xyi}^0 = K_{xy}^0 = 3.87$ м/сут, $K_{zi}^0 = K_z^0 = 0.0019$ м/сут ($i = 1, \dots, 80$) определялись из минимума функции невязки (2) (пласт считался однородным с двумя неизвестными значениями коэффициента фильтрации K_{xy}^0, K_z^0). Остановка процесса минимизации проводилась по достижении точности по невязкам $\varepsilon = 10^{-6}$.

Модельная задача решалась с четырьмя вариантами размеров блоков.

Вариант 1. Размер блока 100 м × 100 м × 10 м. Общее число блоков 23 040.

Вариант 2. Размер блока 50 м × 50 м × 10 м. Общее число блоков 92 160.

Вариант 3. Размер блока 25 м × 25 м × 10 м. Общее число блоков 368 640.

Вариант 4. Размер блока 12.5 м × 12.5 м × 10 м. Общее число блоков 1 474 560.

5. Схемы решения задачи с использованием параллельных вычислений и численные результаты. На каждой итерации процесса минимизации функции невязки вычисляются значения функции невязки и элементы матрицы чувствительности, что требует неоднократного решения СЛАУ большой размерности. Для уменьшения времени решения задачи можно использовать параллельные вычисления. При вычислении матрицы чувствительности ее столбцы вычисляются независимо друг от друга, что позволяет использовать многопроцессорную технику. Кроме того, можно использовать графические вычислительные устройства (ГПУ) для решения СЛАУ.

В данной работе используются следующие приемы для распараллеливания вычислений:

- 1) MPI-технология для распределения по процессам вычислений столбцов матрицы чувствительности;
- 2) библиотека OpenMP для распределения по потокам вычислений столбцов матрицы чувствительности;
- 3) технология CUDA для решения систем линейных алгебраических уравнений на графических вычислительных устройствах.

Численные расчеты проводились на вычислительном кластере “ГрафИТ!”/“GraphIT!” НИВЦ МГУ. Основные характеристики кластера приведены в табл. 1.

Таблица 1

Число ЦПУ в системе	32 процессора, 192 ядра
Число ГПУ в системе	48
Число вычислительных узлов	16
Центральный процессор	Intel ®Xeon X5650, 6 ядер, 2 процессора на узел
Графический процессор	NVidia ®“Fermi” Tesla M2050

Таблица 2

Время решения (с) первого варианта модельной задачи

Метод	Схема		
	первая	вторая	третья
ЛМ	20 767	1711	645
ДЛМ	5635	486	185

Вычисления проводились в режиме 1 MPI-процесс на 1 ГПУ, при этом на каждый узел (12 ядер, 3 ГПУ) назначалось по 3 процесса. Все вычисления проводились с двойной точностью.

Рассмотрим три схемы решения задачи.

Первая схема. Параллельные вычисления не используются (1 MPI-процесс, 1 поток).

Вторая схема. Параллельные вычисления используются для построения матрицы чувствительности. Создаются 15 MPI-процессов, по которым распределяются столбцы матрицы чувствительности.

Третья схема. Отличается от второй тем, что внутри каждого процесса создается 4 потока, каждый поток вычисляет свой столбец матрицы чувствительности и в случае необходимости переходит к вычислению следующего.

Сравним время решения первого варианта модельной задачи, полученное методами ЛМ и ДЛМ. Отметим, что заданная точность по напору была достигнута за 223 итерации при решении задачи методом ЛМ и за 63 итерации методом ДЛМ. В табл. 2. приведено время решения задачи по трем схемам. Во всех трех схемах при решении СЛАУ использовался метод сопряженных градиентов с предобусловливанием в виде неполного разложения Холесского.

Из приведенных результатов видно, что использование параллельных вычислений (вторая и третья схемы) в методах ЛМ и ДЛМ дает примерно одинаковый выигрыш по времени: в 12 и 11.6 раз по второй схеме, в 32 и 30 раз по третьей схеме соответственно. При решении задачи по третьей схеме метод ДЛМ в 3.5 раза быстрее по времени по сравнению с методом ЛМ. Исходя из этого далее будет использоваться только метод ДЛМ.

На каждой итерации метода ДЛМ требуется решение СЛАУ, полученных при аппроксимации уравнения (1), и уравнений, полученных дифференцированием уравнения (1). Рассмотрим четвертую схему решения задачи, которая отличается от второй тем, что каждый MPI-процесс для решения СЛАУ использует ГПУ. При параллельной реализации на ГПУ метода сопряженных градиентов для выполнения стандартных матричных операций использовались стандартные библиотеки CUBLAS и CUSPARSE.

Эффективность использования ГПУ зависит от возможности распараллеливания вычислений. В табл. 3 приводится время выполнения одной итерации методом ДЛМ, полученное по второй (без использования ГПУ) и четвертой (с использованием ГПУ) схемам с различным предобусловливанием в методе сопряженных градиентов.

Из приведенных результатов видно, что для всех вариантов задачи наилучшее время на ЦПУ получено с предобусловливанием в виде неполного разложения Холесского. Для всех вариантов предобусловливания время решения задачи на ГПУ по сравнению с ЦПУ уменьшается, при этом с увеличением размерности задачи растет выигрыш по времени (например, в случае полиномиального предобусловливания отношение времени решения на ЦПУ к времени решения на ГПУ составило 1.8; 6.7; 14.2; 17.7 для 1–4 вариантов соответственно). Наилучшее время на ГПУ получено при использовании полиномиального предобусловливателя. Отношение времени решения на ЦПУ с предобусловливанием в виде неполного разложения Холесского ко времени решения на ГПУ с полиномиальным предобусловливанием составило 1.17; 4.3; 9.02; 11.8 для 1–4 вариантов задачи соответственно.

Исходя из полученных результатов предлагается пятая схема решения модельной задачи. При построении матрицы чувствительности столбцы матрицы распределяются по MPI-процессам и по потокам. Отличие от третьей схемы состоит в том, что один из четырех потоков каждого MPI-процесса использует ГПУ вместо ЦПУ. Если поток, использующий ГПУ, закончил вычисления, а на потоках, использующих ЦПУ, вычисления продолжаются, то на одном из потоков, использующих ЦПУ, вычисления останавливаются, и итерационный процесс решения продолжается на потоке с ГПУ. При вычислении значений функции невязки соответствующая СЛАУ решается на ГПУ. При решении СЛАУ на ЦПУ используется метод сопряженных градиентов с предобусловливанием в виде неполного разложения Холесского, при решении СЛАУ на ГПУ — метод сопряженных градиентов с полиномиальным предобусловливанием.

Время выполнения одной итерации и общее время решения для всех вариантов модельной задачи по первой, третьей и пятой схемам приведено в табл. 4.

Из приведенных в табл. 4 результатов видно, что использование пятой схемы по сравнению с третьей

Таблица 3
Время выполнения (с) одной итерации с различным предобусловливанием

Вариант	Схема					
	вторая			четвертая		
	IC	DS	POL	IC	DS	POL
1	6.05	11.3	9.35	5.24	9.72	5.19
2	48.59	91.64	75.67	31.38	19.56	11.26
3	388.56	740.76	612.74	224.46	56.66	43.09
4	3361	6080	5133	1770	333.48	284.9

Таблица 4
Время (с), полученное по первой, третьей и пятой схемам

Схема	Итерации	Вариант			
		1	2	3	4
первая	одна	73	582	4752	40181
	все	5635	—	—	—
третья	одна	2.22	19.33	145.45	1334
	все	185	1336	10281	85911
пятая	одна	2.44	8.32	36.08	256
	все	191	630	2636	18503

при решении первого варианта модельной задачи не ведет к сокращению времени решения, а для 2–4 вариантов позволяет сократить общее время решения задачи в 2.1, 3.9, 4.6 раз соответственно. Сравнение результатов, полученных по второй и четвертой схемам (без распределения по потокам) и по третьей и пятой схемам (с распределением по потокам), показывает, что при проведении вычислений только на ЦПУ использование потоков дает выигрыш по времени примерно в 2.5 раза для всех вариантов модельной задачи. При использовании вычислений на ГПУ выигрыш по времени от использования потоков уменьшается с увеличением размерности задачи с 2.1 до 1.1 раза. Это объясняется тем, что с увеличением размерности задачи растет доля вычислений, проводимых на ГПУ. Время выполнения одной итерации по пятой схеме по сравнению с первой схемой (без использования параллельных вычислений) меньше в 30, 70, 132 и 157 раз для вариантов 1–4 модельной задачи соответственно. Общее время решения по пятой схеме по сравнению с первой схемой в первом варианте модельной задачи меньше в 30 раз. Варианты 2–4 модельной задачи по первой схеме не решались, поскольку это заняло бы много времени.

5. Заключение. Проведено исследование возможности использования гетерогенных вычислительных систем для решения задачи идентификации коэффициента фильтрации. Построены параллельные схемы вычислений для стандартного и двухшагового метода Левенберга–Марквардта минимизации функции невязки. На примере решения модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации показано, что использование двухшагового метода Левенберга–Марквардта позволяет существенно сократить время решения задачи. Показана зависимость времени решения задачи от применения многопоточных вычислений, использования графических вычислительных устройств и распределения вычислений по MPI-процессам.

Из приведенных численных результатов видно, что при решении систем линейных алгебраических уравнений на ЦПУ предпочтительнее применение предобусловливания в виде неполного разложения Холесского, а при решении на ГПУ — полиномиального предобусловливателя. Эффективность использования графических вычислительных устройств растет с увеличением размерности задачи. Наименьшее время решения в задачах большой размерности получено при использовании многопоточности и комбинации вычислений на ЦПУ и ГПУ. Наибольший выигрыш по времени (157 раз) при использовании 15-ти ГПУ был получен при решении варианта 4 модельной задачи с расчетной областью, состоящей из 1 474 560 блоков.

Вычисления проводились на вычислительном кластере “ГраФИТ!” НИВЦ МГУ, доступ к которому был получен по итогам конкурса “Эффективное использование GPU-ускорителей при решении больших задач”, проведенного группой компаний “Т-Платформы” при поддержке МГУ имени М. В. Ломоносова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yeh W. W.-G. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problem // *Water Resour. Res.* 1986. **22**, N 2. 95–108.
2. Sun N.-Z. Inverse problems in groundwater modeling. Norwell: Kluwer, 1994.
3. Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир, 1988.
4. Летова Т.А., Пантелеев А.В. Экстремум функций в примерах и задачах. М.: Изд-во МАИ, 1998.
5. Hill M. C. Methods and guidelines for effective model calibration. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations. Report 98-4005. Denver, 1998.
6. Гилл Ф., Мюррей М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985.
7. Елесин А.В., Кадырова А.Ш., Мазуров П.А. Двухшаговые методы Левенберга–Марквардта в задаче идентификации коэффициента фильтрации // *Георесурсы*. 2009. **4(32)**. 40–42.
8. Мазуров П.А., Елесин А.В., Кадырова А.Ш. Квазиьютоновский двухшаговый метод минимизации функции невязки // *Вычислительные методы и программирование*. 2009. **10**, № 1. 64–71.
9. Мироненко В.А. Динамика подземных вод. М.: Изд-во МГГУ, 1996.
10. Цепяев А.В. Методы декомпозиции для решения трехмерных задач движения жидкости в пористых средах: Дисс. канд. физико-математических наук: 05.13.18, 2008.
11. Larabi A., de Smedt F. Solving three-dimensional hexahedral finite element groundwater models by preconditioned conjugate gradient methods // *Water Resour. Res.* 1994. **30**, N 2. 509–521.
12. Голуб Дж., ван Лоун Ч. Матричные вычисления. М.: Мир, 1999.

Поступила в редакцию
14.11.2011