

УДК 550.8.028

ПРИМЕНЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЁННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ К РАСЧЁТУ АПОСТЕРИОРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

© 2014 г. И.М. Алёшин, К.И. Холодков

Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН, г. Москва, Россия

Рассмотрены вопросы упрощения использования распределённых вычислительных систем (грид) в геофизическом моделировании. Основное внимание уделено техническим аспектам разработки веб-приложения, в частности, механизму интеграции проблемно-специфических элементов этого приложения и промежуточного программного обеспечения. В работе описан ряд технических особенностей реализации вычислительных кластеров и разработанного программного обеспечения, включая виртуализацию вычислительных узлов и применение высокоуровневых примитивов программирования. В качестве примера приводится решение задачи определения параметров анизотропии коры и верхней мантии по данным телесейсмических наблюдений. Разработанное программное обеспечение предоставляет возможность точного численного решения задачи в терминах формализма апостериорной функции распределения. Проведено сравнение с результатами, полученными приближенными методами.

Ключевые слова: обратная задача, анизотропия коры и верхней мантии, распределённые вычислительные системы, грид, приложение для грид.

Введение

Впервые получение точного численного решения задачи инверсии сейсмических данных для определения параметров анизотропии с использованием распределённых вычислительных систем было описано в [Алёшин и др., 2009], где глобальный минимум целевого функционала определялся на основе расчетов на прямоугольной решётке в пространстве параметров. Расчёт производился на распределённой вычислительной системе (грид) EGEE¹ [Enabling..., 2010], использующей промежуточное программное обеспечение *gLite*, которое в настоящее время является частью проекта *European Middleware Initiative* (<http://www.eu-emi.eu>). Для запуска не применялось никаких средств автоматизации; все необходимые процедуры выполнялись вручную.

Промежуточное программное обеспечение, по сути, является интерфейсом, обеспечивающим взаимодействие с ресурсами вычислительной системы, управление которым подразумевает наличие специальных навыков взаимодействия с промежуточным программным обеспечением. Очевидным решением, которое позволило бы исследователям, не имеющим таких навыков, воспользоваться ресурсами грид, является упрощение взаимодействия пользователя и грид. Обычно подобные задачи решаются созданием так называемой “обёртки” (*wrapper*) одного интерфейса вокруг другого – простого вокруг сложного². При этом в процессе реализации разработки на базе трёх академических институтов была развёрнута грид-инфраструктура с применением промежуточного программного обеспечения *Globus Toolkit* (<http://toolkit.globus.org>), использованная и в настоящей работе. Один из заметных недостатков указанной реализации – сложность

¹ Проект ЦЕРН “Enabling Grid for e-Science” (<http://eu-egee-org.web.cern.ch/eu-egee-org/index.html>).

² Опыт разработки подобного рода приведён в работах [Алёшин и др., 2013; Kholodkov, 2013].

даже незначительной модификации приложения; разработка же интерфейса под другую задачу требует переработки всего кода. Кроме этого, промежуточное программное обеспечение *Globus Toolkit* жестко интегрировано с компонентами, которые при использовании веб-интерфейса не только не применяются, но и, наоборот, требуют специальных усилий для их обхода. Поэтому при создании предлагаемого варианта был сделан ряд принципиальных изменений, в частности, вместо непосредственного обращения к компонентам промежуточного программного обеспечения веб-интерфейс теперь взаимодействует с так называемой платформой интеграции, назначение которой как раз и состоит в обеспечении взаимодействия с грид-инфраструктурой. Это позволило разделить специфические для задачи элементы веб-интерфейса и внутренние рутины, выполнив их в виде отдельных компонент. Дополнительное упрощение было достигнуто за счёт использования вместо *Globus Toolkit* промежуточного программного обеспечения *Gridway* (<http://gridway.org>). В качестве тестового примера, как и в предыдущих работах, был реализован интерфейс к задаче определения параметров сейсмической анизотропии.

Программная реализация вычислительной системы

Как и ранее, мы использовали грид-систему, состоящую из двух вычислительных кластеров, управляемых менеджером ресурсов *Torque* (<http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>), и узла взаимодействия с пользователем (управляющий узел), на котором развёрнуто промежуточное программное обеспечение *Gridway*, платформа интеграции и веб-приложение. Вычислительные узлы представляют собой кластер виртуальных машин под управлением гипервизора *KVM* [IBM..., 2013]. Использование виртуальных машин позволяет гибко регулировать вычислительные нагрузки за счёт изменения количества доступных процессорных ядер и объёма оперативной памяти. Кроме этого, решение задач, требующих дополнительных нестандартных компонентов, выполняется на специально подготовленных “клонах” виртуальных вычислительных узлов, что избавляет от необходимости вручную устанавливать дополнительные компоненты и переконфигурировать программное обеспечение на многочисленных узлах кластера при смене исполняемой задачи.

Технология виртуализации, применяемая в данной работе, практически не снижает производительность системы [Uhlig et al., 2005; Advanced..., 2005]. Это достигается за счёт использования аппаратного ускорения виртуализации, в частности, технологий *VT-x* и *Extended Page Tables* [Intel ..., 2008], которые позволяют виртуальным машинам работать практически без потерь производительности. Для проверки нами было проведено тестирование одного аппаратного вычислительного узла при помощи инструментов *HPL* [Petitet et al., 2008], в которых производительность системы оценивается по скорости решения системы линейных уравнений. Данный тест является де факто стандартом в оценке производительности суперкомпьютеров и вычислительных кластеров. Из приведенных в табл. 1 данных следует, что пиковая потеря производительности составила приблизительно 5.5%.

Технология, к сожалению, не лишена недостатков. В частности, гипервизор *KVM* замедляет сетевой обмен между виртуальными вычислительными узлами, однако на решение нашей задачи этот недостаток не оказывает существенного влияния из-за малого сетевого трафика.

Таблица 1. Сравнение изменения производительности вычислительной системы при использовании технологии виртуализации

Количество серверов	Средняя производительность, Гфлоп		Разница, %
	виртуальный узел	аппаратные узлы	
1	17.65	17.87	1.05
6	100.02	105.9	5.55

Примечание. В первой строке приведены средние значения производительности одного аппаратного сервера и эквивалентного ему виртуального сервера; во второй – аналогичные величины для 6 серверов. Потеря производительности в последнем случае объясняется неоптимальностью реализации механизма сетевого обмена между виртуальными узлами.

Промежуточное программное обеспечение *Gridway*, установленное на управляющем узле, представляет собой метапланировщик, основное назначение которого состоит во взаимодействии с системами управления кластерами. Метапланировщик представляет собой набор реализованных в виде программ и скриптов компонентов, каждый из которых выполняет одну из трёх ролей: сбор информации о состоянии вычислительного узла, запуск заданий на узле, обмен данными между узлами.

Назначение платформы интеграции состоит в обеспечении взаимодействия веб-интерфейса, отражающего специфику задачи, и промежуточного программного обеспечения. При разработке платформы интеграции мы, по возможности, применяли стандартные схемы программирования. В частности, использование объектно-реляционного отображения *ORM* (от английского *Object-Relational Mapping*) связало объектную структуру объектно-ориентированного языка программирования с реляционной структурой в СУБД. Как следствие, не потребовалось писать код, непосредственно взаимодействующий с СУБД, что ускорило процесс разработки и позволило избежать ряда возможных ошибок. Использование *ORM* сказывается на производительности приложения и объёме используемой памяти, однако в случае с платформой интеграции это, на наш взгляд, допустимый компромисс. Следование шаблону проектирования *MVC* (от английского *Model-View-Controller* – Модель-вид-контроллер) облегчило масштабируемость системы, делая доступными для модификаций менее крупные обособленные единицы кода. *MVC* – шаблон проектирования приложения, в котором модель данных, пользовательский интерфейс и поведение приложения разделены на три отдельных части так, чтобы модификация одного из компонентов оказывала минимальное влияние на остальные. Использование только распространённых библиотек и программных платформ облегчает возможное развитие проекта.

Специфичные для конкретной задачи элементы максимально логически отделены от основной части платформы интеграции. Платформа интеграции является в полном смысле программной платформой, предоставляющей программные интерфейсы. Используя эти интерфейсы, можно разработать веб-интерфейс для решения различных задач, и при этом нет необходимости непосредственного взаимодействия с промежуточным программным обеспечением.

В качестве примера был разработан веб-интерфейс точного численного решения задачи определения параметров анизотропии коры и верхней мантии. Предоставляемый веб-интерфейс максимально облегчён, а внутренние программные процессы максимально автоматизированы. Он спроектирован таким образом, что взаимодействие браузера и сервера сведено к передаче команд и получению данных без перезагрузки всего интерфейса на каждом этапе работы пользователя.

Практическое применение

Для примера реализован веб-интерфейс применительно к задаче определения анизотропных сейсмических свойств коры и верхней мантии по волновым формам обменных волн и волн *SKS* [Винник, Левшин, 1976]. Важность задачи определяется тем, что возникновение анизотропии в верхней мантии обычно связывают с тектоническими движениями. При этом направление оси анизотропии указывает на направление движения плиты (современное или историческое) [Nicolas, Christensen, 1987; Savage, 1999].

В качестве входных данных использованы волновые формы приемных функций и фаз *SKS*, подробности обработки которых описаны в [Vinnik et al., 2007]. Модель под сейсмостанцией представлялась в виде пачки однородных слоёв, лежащих на однородном же изотропном полупространстве. Предполагается, что некоторые из слоев имеют гексагональную симметрию с горизонтально ориентированной осью. Цель инверсии состоит в определении анизотропных параметров каждого из слоёв.

В качестве целевого функционала мы использовали стандартное отклонение наблюдаемых волновых форм от синтетических трасс, рассчитанных методом Томсона–Хаскелла [Kosarev et al., 1979]. Расчёт целевых функционалов

$$C(D^a, S^a(\vec{m})) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_i^n (d_i^a - s_i^a(\vec{m}))^2},$$

проводился отдельно для волновых форм обменных волн и каждой из *SKS*-трасс (количество последних различно на разных станциях). Здесь $D^a = \{d_i^a\}$ и $S^a = \{s_i^a\}$ – наблюдаемая и синтетическая волновые формы; индекс a обозначает разные типы данных, в нашем случае – *SKS* и приемные функции. Такое разделение дает возможность анализа согласованности данных разного типа между собой.

В отличие от работы [Алёшин и др., 2009] для решения обратной задачи использовался аппарат апостериорной функции распределения (АПФР) вероятности [Tarantola, 1987]. Основная идея метода основывается на том, что данные наблюдений не могут быть получены точно. Кроме того, выбранная модель, являясь приближением, не может полностью объяснить данные наблюдений. Для простоты положим, что все указанные неопределённости можно параметризовать одним скаляром ε . Тогда в результате мы получим, вообще говоря, континуум моделей, определяемых, например, условием $C(D^a, S^a(\vec{m})) < \varepsilon$. Очевидно, что все модели, удовлетворяющие такому условию, одинаково хорошо объясняют наблюдения.

В данной работе наблюдения трактуются нами как реализация случайного процесса. Можно показать [Tarantola, 1987], что функция правдоподобия

$$\sigma(D^a, \vec{m}) = A \rho_1(\vec{m}) \rho_2(D^a) e^{\frac{-C(D^a, S^a(\vec{m}))}{\varepsilon}}$$

определяет условную вероятность того, что параметры модели имеют значения \vec{m} при том, что наблюдения имеют значение D^a . Здесь A – нормировочная константа; $\rho_1(\vec{m})$ – априорное распределение вероятности возможных значений параметров модели; $\rho_2(D^a)$ – распределение, определяющее разброс данных наблюдений. Поскольку нас интересует распределение вероятности параметров модели для всех возможных значений данных, мы должны проинтегрировать $\sigma(D^a, \vec{m})$ по D^a :

$$\sigma(\vec{m}) = \int_{D^a} A\rho_1(\vec{m})\rho_2(D^a)e^{\frac{-C(D^a, S^a(\vec{m}))}{\varepsilon}}.$$

В простейшем случае можно положить, что $\rho_2(D^a)$ есть дельта-функции Дирака. Это можно трактовать как использование идеального инструмента либо как полное отсутствие возможности оценки разброса данных. Тогда из предыдущей формулы получаем:

$$\sigma(\vec{m}) = A\rho_1(\vec{m})e^{\frac{-C(D^a, S^a(\vec{m}))}{\varepsilon}}.$$

Теперь, имея дело с плотностью распределения вероятности, мы можем использовать методы статистического анализа для определения всех свойств модели: вычислить средние значения параметров, их дисперсии и остальные моменты распределения, рассчитать двухмерные маргинальные распределения для всех пар параметров, получить другие характеристики решения. Следует подчеркнуть, что для проведения подобного анализа необходимо иметь значения функции для всех точек пространства параметров. Таким образом, точное численное решение обратной задачи сводится к табулированию функции $\sigma(m)$. Это можно сделать, например, проведя вычисления её значений на прямоугольной решётке. Даже при относительно небольшом числе параметров эта процедура может занимать неприемлемо много времени, что делает задачу практически невыполнимой без привлечения значительных вычислительных мощностей. Однако в силу того, что вычисления в каждой точке выполняются независимо друг от друга, при расчете не возникает необходимости взаимодействия между параллельными вычислительными процессами, что и обуславливает применение грид.

Описанный выше подход был реализован при создании веб-интерфейса задачи инверсии волновых форм *SKS* и обменных волн. Интерфейс позволяет задавать параметры расчёта, загружать файлы с волновыми формами, а также оценить время исполнения задания при выбранных значениях параметров модели. Все действия производятся при помощи стандартного веб-браузера. Степень выполнения задания отображается с помощью графического индикатора. По окончании расчёта можно воспользоваться простейшими инструментами визуализации или загрузить результаты на локальный компьютер для дальнейшего анализа.

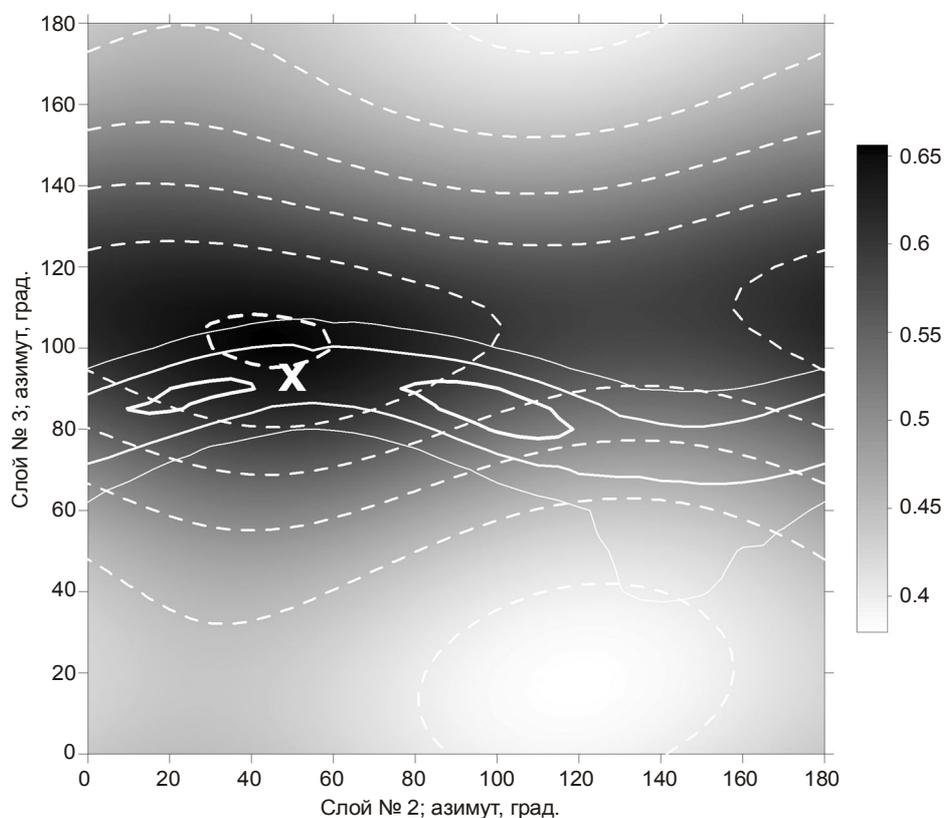
Ниже приведены результаты выполненных с использованием созданной системы расчётов АПФР для данных станции *ААК*, установленной на Тянь-Шане и входящей в состав сейсмической сети *GSN/IRIS*. В инверсии участвовали волновые формы обменных волн для 18 азимутальных секторов и 4 волновых формы *SKS*. Для анализа была использована модель, состоящая из трёх лежащих на полупространстве слоёв, два из которых анизотропные (табл. 2).

Таблица 2. Параметры сейсмической модели, использованной для тестовых расчетов

	Слой 1	Слой 2	Слой 3	Слой 4
Скорость продольных волн, V_P , км/с	6.40	8.10	8.10	8.50
Скорость поперечных волн V_S , км/с	3.70	4.50	4.50	4.72
Плотность ρ , г/см ³	2.9	3.3	3.3	3.4
Толщина слоя H , км	40	60	100	∞
Азимут гексагональной оси симметрии φ , град.	–	30	100	–
Коэффициент анизотропии α_S	0.00	0.04	0.02	0.00
Коэффициент η	1.0	1.03	1.03	1.0

Расчёт производился для следующих значений параметров: коэффициент анизотропии S -волн – в пределах от 0 до 0.05 с шагом 0.01. Толщина слоёв менялась в пределах от 50 до 100 км с шагом 10 км, азимут оси анизотропии – от 0 до 175 градусов с шагом 5 градусов. Применение грид ускоряет расчёты в 30–50 раз, сводя время вычислений до нескольких часов вместо нескольких дней, необходимых при использовании персонального компьютера.

На приводимом ниже рисунке представлены двумерные сечения АПФР для обменных волн и волн SKS , проходящие через точку максимума распределений. Сечения построены для физически значимых величин – азимутов оси анизотропии слоёв. Можно видеть, что максимумы АПФР в этой плоскости для SKS является бимодальным. Положение одного из максимумов достаточно хорошо согласуется с единственным максимумом распределения, рассчитанного для обменных волн. Определённые таким образом направления осей согласуются с полученными приближенным методом результатами из работы [Vinnik et al., 2007].



Двумерные сечения апостериорных функций распределения, рассчитанных по обменным волнам (градации серого и пунктирные изолинии) и волнам SKS (сплошные изолинии) для станции ААК. Показаны значения функций для азимутов гексагональных осей анизотропии. Используются данные работы [Vinnik, 2007], крестик соответствует результату этой работы

Заключение

Показано, что представленная программная платформа позволяет разработать, направленное на решение определённого класса задач веб-приложение, которое эксплуатирует вычислительные ресурсы грид, при этом пользователь никак не взаимодействует с промежуточным программным обеспечением.

Использование технологии виртуальных вычислительных узлов добавляет гибкость системе, а использование программного обеспечения *Gridway* существенно упрощает взаимодействие с небольшой грид-инфраструктурой. Следует, однако, помнить, что при необходимости интеграции приложения с грид-инфраструктурами больших масштабов возникнет необходимость в использовании более сложного, но и более универсального промежуточного программного обеспечения *Globus Toolkit* или *gLite*.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 43П по стратегическим направлениям развития науки на 2014 г. “Фундаментальные проблемы математического моделирования”.

Литература

- Алёшин И.М., Мишин Д.Ю., Жижин М.Н., Корягин В.Н., Медведев Д.П., Новиков А.М., Перегудов Д.В. Применение распределённых вычислительных систем при определении параметров сейсмической анизотропии коры и верхней мантии // Геофизические исследования. 2009. Т. 10, № 4. С.34–47.
- Винник Л.П., Левшин А.П. Исследования мантии Земли сейсмическими методами. М.: Наука, 1976. 200 с.
- Косарев Г.Л., Макеева Л.И., Саваренский Е.Ф., Чесноков Е.М. Влияние анизотропии под сейсмостанцией на объёмные волны // Физика Земли. 1979. № 2. С.26–37.
- Advanced Micro Devices, Inc. Advanced Micro Devices (AMD) AMD64 Virtualization Codenamed “Pacifica” Technology Secure Virtual Machine Architecture Reference Manual // 33047–Rev. 3.01–May 2005.
- IBM Corporation KVM and open virtualization: Who’s using it, how and why? // IBM Systems and Technology. Somers, NY, USA. May 2013.
- Intel Corporation. First the Tick, now the Tock: Next Generation Intel Microarchitecture (Nehalem) // Whitepaper, Intel Corporation, 2008.
- Kholodkov K.I. Implementation of seismic data inversion as grid-backed web service // Russian journal of Earth sciences. 2013. N 13.
- Nicolas A., Christensen N.I. Formation of anisotropy in upper mantle peridotites: a review, in: Fuchs K., Froideveaux C. (Eds.). Composition, Structure and Dynamics of the Lithosphere Asthenosphere System // Amer. Geophys. Union, Geodyn. 1987. Ser. 16. P.111–123.
- Petit A., Whaley R.C., Dongarra J., Cleary A. HPL – A Portable Implementation of the High-Performance Linpack Benchmark for Distributed-Memory Computers / University of Tennessee, Knoxville, Innovative Computing Laboratories. <http://www.netlib.org/benchmark/hpl>, 2008.
- Savage M.K. Seismic anisotropy and mantle deformation: what have we learned from shear wave splitting? // Rev. Geophys. 1999. V. 31, Is. 1. P.65–106.
- Tarantola A. Inverse problem theory; methods for data fitting and model parameter estimation. Elsevier, 1987. 613 p.
- Uhlig R., Neiger G., Rodgers D., Santoni A.L., Martins F.C.M., Anderson A.V., Bennett S.M., Kagi A., Leung F.H., Smith L. Intel Virtualization Technology // Computer, IEEE Computer Society. 2005. V. 38.
- Vinnik L.P., Kiselev S.G., Kosarev G.L., Makeyeva L.I. Depth localized azimuthal anisotropy from SKS and P receiver functions: The Tien Shan // Geophys. J. Int. 2007. V. 169. P.1289–1299.

Сведения об авторах

АЛЁШИН Игорь Михайлович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН. 123995, ГСП-5, Москва, Д-242, ул. Большая Грузинская, д. 10, стр. 1. Тел.: +7(499)254-92-24. E-mail: ima@ifz.ru; ведущий научный сотрудник, Геофизический центр РАН. 119296, г. Москва, ул. Молодежная, д. 3.

ХОЛОДКОВ Кирилл Игоревич – ведущий инженер, Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН. 123995, ГСП-5, Москва, Д-242, ул. Большая Грузинская, д. 10, стр. 1. Тел.: +7(499)254-92-24. E-mail: keir@ifz.ru

USING DISTRIBUTED COMPUTING SYSTEMS FOR A POSTERIORI DISTRIBUTION COMPUTATION

I.M. Aleshin, K.I. Kholodkov

Schmidt Institute of Physics of the Earth, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Abstract. We consider a way to simplify of distributed computing system (grid) application in geophysics. Technical aspects of web-application design are emphasized, including details of integration of application specific parts into middleware. The work describes technical details of implementation of computing clusters and software we have created. The solution involved compute node visualization and application of modern programming techniques. As a pilot application we have implemented is determination of anisotropic parameters of crust and upper mantle with teleseismic data. The software allowed exact numerical solution utilizing *a posteriori* distribution function formalism. Consequently, acquired result was compared to results of similar task solved with approximate methods.

Keywords: inverse problem, mantle and core anisotropy, distributed computing systems, grid, grid application.