Параллельная реализация глобальной математической модели переноса трейсера в атмосфере (NIES TM) с использованием двухмерной декомпозиции расчетной области

Е.А. Данилкин, Д.А. Беликов, Ш.Ш. Максютов
Томский государственный университет
National Institute for Environmental Studies, Tsukuba, Japan

Разработан эффективный метод распараллеливания глобальной транспортной модели NIES TM путем двухмерной декомпозиции расчетной области с использованием интерфейса MPI. Полученный параллельный алгоритм удовлетворяет следующим требованиям:

1. *Существенное ускорение при проведении прямого и обратного моделирования переноса трейсеров в атмосфере.*
2. *Достижение приемлемой масштабируемости задачи на системах с распределенной памятью различной конфигурации.*

Модель NIES TM. Основные характеристики модели

NIES TM (the National Institute for Environmental Studies Transport Model) – глобальная трехмерная модель переноса трейсера в атмосфере разработана в Национальном Институте Экологических Исследований (Япония) [1, 2].

Как и в предыдущих версиях [1, 2], для описания переноса трейсеров (инертных газообразных примесей) в атмосфере NIES TM использует транспортное уравнение, записанное в эйлеровой форме:

$$\frac{dq^k}{dt} = \frac{\partial q^k}{\partial t} + \mathbf{V}\cdot\nabla_\sigma q^k + \dot{\sigma}\cdot\frac{\partial q^k}{\partial \sigma} = \frac{\partial}{\partial \sigma}F^k + S^k,$$
$$\nabla_\sigma = \frac{\partial}{R\cos(\varphi)\partial\lambda} + \frac{\partial}{R\partial\varphi}. \qquad (1)$$

NIES TM – офлайн-модель, в которой в качестве входных метеорологических данных используются результаты глобального реанализа (JRA-25/JCDAS) с разрешением 1.25°×1.25°×40 и шагом 6 ч [3]. Модель консервативна, для этого входные горизонтальные массовые потоки балансируются по схеме, описанной в [4], для того чтобы вертикально интегрированные изменения массы воздуха находились в балансе с тенденцией изменения давления на поверхностности.

Аппроксимация адвективных членов выполнена в рамках эйлерова потокового подхода на основе схемы Ван Лира второго порядка. При численной реализации модели используется широтно-долготная разностная сетка, покрывающая весь земной шар. Как следствие, в области полюсов плотность ячеек расчетной сетки в меридиональном направлении существенно выше, чем в области экватора. Чтобы избежать сингулярности вблизи полюсов, вызванной небольшим размером ячеек, предложенная модель использует разреженную долготную сетку, в которой размер ячеек по долготе несколько раз удваивается при приближении к полюсам. Такой подход позволяет преодолеть жесткое ограничение по числу Куранта в приполярных регионах, сохранить достаточно высокий шаг интегрирования по времени и гарантирует приемлемую производительность во время проведения численного моделирования, однако вызывает определенные трудности при организации пересылок для параллельных вычислений. Разрешение горизонтальной сетки вблизи экватора – 2.5°×2.5°. В текущей версии модели применяется гибкая гибридная «сигма-изоэнтропическая» (σ–θ) вертикальная координата с 32 уровнями. Параметризация глубокой конвекции разработана по схеме [5], модель турбулентности основана на методе, описанном в [6], с использованием высоты пограничного слоя из ECMWF ERA-Interim реанализа. Более подробная информация о модели представлена в работах [1, 2].

Препроцессинг

При проектировании параллельных алгоритмов принято выделять фрагменты вычислительного кода модели, которые могут быть подготовлены до начала параллельных расчетов и/или слабо поддаются распараллеливанию. В таком случае эти фрагменты следует выполнять на стадии препроцессинга. В случае распараллеливания NIES TM в режиме препроцессинга рассчитываются и записываются в файлы прямого доступа необходимые метеорологические параметры, список которых включает компоненты скорости ветра, массовые потоки на гранях контрольных объемов, геопотенциальную высоту, коэффициенты для параметризации турбулентности и глубокой конвекции. Размер файлов препроцессинга (обозначены как mfdump-файлы) составляет ~10 Гб для моделирования в течение месяца при том, что объем исходных полей реанализа – ~5 Гб в месяц. Наибольший интерес для наших исследований представляет период около 23 лет (~1988–2011), в течение которого активно моделируется перенос различных трейсеров. Таким образом, использование препроцессинга исключает необ-

ходимость многократного пересчета метеорологических параметров, тем не менее требует дополнительно 2,8 Тб дискового пространства для хранения mfdump-файлов.

Сторонние данные для расчета по модели переноса примеси

Дополнительным преимуществом использования режима препроцессинга является возможность применения входных метеорологических данных, подготовленных по модели глобальной циркуляции атмосферы. Весьма перспективным выглядит использование глобальной версии мезомасштабной модели WRF, которая наряду с широким выбором параметризаций, отлаженными методами инициализации, расчета и постобработки данных обладает важным для задач моделирования переноса свойством сохранения массы.

Метод распараллеливания

Для распараллеливания модели был выбран метод двумерной геометрической декомпозиции расчетной области. В соответствии с этим методом каждому процессорному элементу (ПЭ) выделяется сеточная подобласть (рис. 1), в которой он будет производить вычисления значений сеточной функции и выполнять все необходимые для этого вспомогательные процедуры.

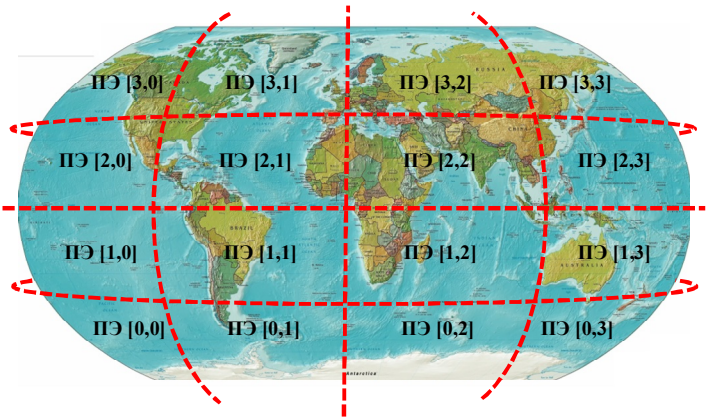

Рис. 1. Геометрическая декомпозиция расчетной области

Следующим после распределения данных по процессорным элементам этапом построения параллельной программы является пла-

нирование коммуникаций, когда устанавливаются связи между блоками, расчеты в которых выполняются параллельно. Вследствие используемого шаблона разностной схемы для вычисления очередного приближения в приграничных узлах требуются значения сеточной функции из области памяти соседнего процессорного элемента. Для этого на каждом вычислительном узле создаются фиктивные ячейки, хранящие данные с соседних вычислительных узлов, а также организованы пересылки этих граничных значений, что необходимо для обеспечения однородности вычислений [7].

Затруднением при планировании коммуникаций является разреженная в направлении от экватора к полюсам горизонтальная сетка модели. Поэтому данные, необходимые соседнему процессорному элементу, предварительно выбираются соответствующим образом из общего массива решения и упаковываются в двумерный массив, пересылаемый соседнему процессорному элементу. Пересылка данных осуществляется с использованием неблокирующей функции передачи сообщений MPI_ISEND, а прием, соответственно, функцией MPI_RECV.

Вторым затруднением при распараллеливании поставленной задачи является необходимость достаточно часто (каждый час модельного времени) выдавать большие объемы результатов моделирования. Это может быть реализовано двумя способами: а) все данные собираются на одном процессорном элементе, с которого затем осуществляется запись результатов расчета в бинарные файлы, б) каждый ПЭ записывает свою часть результатов в общий файл.

Результаты

После завершения разработки и отладки параллельной версии программы проведена оценка эффективности расчетов на нескольких процессорах по сравнению с однопроцессорным вариантом. В первую очередь выполнен ряд вычислительных экспериментов для оценки ускорения работы различных частей программы, осуществляющих схожие функции, в зависимости от количества используемых процессорных элементов. Результаты замеров, а именно время и ускорение работы, представлены в табл. 1 и 2 соответственно. Тестирование проводилось при следующих условиях: расчет переноса одной компоненты примеси (радон ^{222}Rn) в течение одного модельного дня.

Все выполняемые моделью процедуры можно разделить на три типа. Тип первый – процедуры этого типа выполняются быстрее при увеличении количества используемых процессорных элементов. Время

выполнения процедур второго типа не зависит от количества используемых процессорных элементов, например, сюда можно отнести процедуру чтения метеорологических параметров. У процедур третьего типа время работы увеличивается с увеличением количества используемых процессорных элементов.

Таблица 1. Время выполнения отдельных процедур, с

	1	3	9	18	27	36
Чтение метеорологических параметров	0,702	0,832	1,021	1,105	1,069	1,024
Подготовка расчетных полей к новому шагу по времени	6,501	4,009	1,161	0,577	0,377	0,252
Обмен приграничными значениями	0,0	0,271	0,273	0,272	0,277	0,272
Расчет полей концентрации на новом шаге по времени	16,16	7,832	2,408	1,199	0,839	0,616
Общее время без записи результатов	23,364	12,943	4,861	3,151	2,555	2,162
Общее время без записи результатов и считывания метеорологических параметров	22,662	12,111	3,839	2,046	1,486	1,138

Таблица 2. Ускорение выполнения отдельных процедур

	1	3	9	18	27	36
Чтение метеорологических параметров	1	0,84	0,69	0,64	0,66	0,69
Подготовка расчетных полей к новому шагу по времени	1	1,62	5,59	11,27	17,24	25,79
Обмен приграничными значениями		1	1	1	1	1
Расчет полей концентрации на новом шаге по времени	1	2,06	6,71	13,48	19,26	26,23
Общее ускорение без записи результатов	1	1,80	4,81	7,41	9,14	10,80
Общее ускорение без записи результатов и считывания метеорологических параметров	1	1,87	5,90	11,07	15,25	19,91

Из табл. 2 следует, что эффективность распараллеливания процедур подготовки расчетных полей и процедур расчета полей концентрации близка к линейной. Вопросы по эффективности работы вызывает процедура чтения метеорологических данных, эффективность работы ко-

торой замедляется при увеличении числа процессоров (доля от общего времени работы программы значительна – 41,5 %);

Использовать сбор решения на одном процессорном элементе оказалось неэффективно, поэтому в дальнейших расчетах применялся подход, при котором каждый процессорный элемент записывает свой файл результатов. Однако этот подход вызывает определенные сложности при сборе решения, а именно приходится после проведения расчетов собирать все данные в единое целое. Однако такой способ записи дает возможность проводить вычисления с большей эффективностью, а сбор данных можно выполнить, используя одно вычислительное ядро.



Рис. 2. Ускорение работы параллельной программы

Общее ускорение работы полученной параллельной программы представлено на рис. 2 (каждый процессорный элемент осуществляет вывод своей части результатов в отдельный файл). Из рис. 2 видно, что при использовании 9 процессорных элементов параллельная программа работает в 6 раз быстрее, а максимальное ускорение в 15,4 раза получено при использовании 36 процессорных элементов. Также нужно отметить, что эффективность работы параллельной программы уменьшается с увеличением числа используемых процессорных элементов. Так, если при использовании 6 ПЭ эффективность составляет 69 %, то для 36 ПЭ эффективность составляет 42 %.

Заключение

Разработана параллельная версия глобальной транспортной модели NIES TM путем двухмерной декомпозиции расчетной области с использованием интерфейса MPI.

Проведена оценка эффективности работы программного комплекса целиком и отдельных его процедур. Выявлены и устранены слабые места полученной параллельной реализации.

Дальнейшая работа предполагает повышение эффективности работы параллельной программы за счет перехода к использованию параллельных процедур ввода/вывода данных и за счет использования технологии опережающей рассылки.

Литература

1. **Maksyutov S., Patra P. K., Onishi R. et al.** NIES/FRCGC global atmospheric tracer transport model: description, validation, and surface sources and sinks inversion // J. Earth Simulator. – 2008. – Vol. 9. – P. 3–18.
2. **Belikov D., Maksyutov S., Miyasaka T. et al.** Mass-conserving tracer transport modeling onareducedlatitude-longitude grid with NIES-TM // Geosci. Model Dev. – 2011. – Vol. 4. – P. 207–222.
3. **Onogi K., Tsutsui J., Koide H. et al.** The JRA-25 Reanalysis // J. Met. Soc. Jap. – 2007. – Vol. 85(3). – P. 369–432.
4. **Heimann M**., **Keeling C.** A three-dimensional model of atmospheric CO2 transport based on observed winds: 2: Model description and simulated tracer experiments // Geophys. Mon. – 1989. – Vol. 55. – P. 237–275.
5. **Tiedtke M.** A comprehensive mass flux scheme for cumulus parameterization in large scale models // Mon. Weather Rev. – 1989. – Vol. 117. – P. 1779–1800.
6. **Hack J.J., Boville B.A., Briegleb B.P. et al.** Description of the NCAR community climate model (CCM2) // NCAR/TN-382. – 1993. – 108 p.
7. **Данилкин Е.А.** К вопросу об эффективности 3D-декомпозиции при численном решении уравнения переноса с использованием МВС с распределенной памятью // Вестник ТГУ. Механика и математика. – 2008. – № 2 (3). – С. 39–46.