РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛЕЙ АТМОСФЕРЫ НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРАХ

М.А. Толстых, В.Н. Глухов

Институт вычислительной математики РАН

Введение

Численный прогноз погоды и моделирование климата всегда были областями, где требуются высокопроизводительные компьютеры. Для их использования программная реализация модели должна учитывать особенности параллельной архитектуры этих компьютеров.

В этой статье представлены параллельные реализации двух глобальных трехмерных атмосферных моделей, развиваемых в Институте вычислительной математики Российской академии наук. Первая модель – это эйлерова климатическая модель, а вторая – полулагранжева, предназначена для использования в численном прогнозе погоды. Мы будем называть их модель климата и модель прогноза погоды соответственно. Обе модели используют одну и ту же систему уравнений – уравнения типа Навье-Стокса на вращающейся сфере с некоторыми дополнительными допущениями (например, гидростатическое приближение). Модели отличаются специфической формой уравнений и способом их дискретизации.

Описываемые подходы к распараллеливанию могут быть также применены для задач несжимаемой вычислительной газовой динамики.

Система уравнений для влажной атмосферы может быть записана как

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + A\varphi + B\varphi = F, \qquad (1)$$

где $\varphi = (u, v, T, q, \ln \pi)^T$ – вектор состояния системы; u, v – компоненты горизонтального вектора скорости; T – температура; q – удельное влагосодержание воздуха; π – приземное давление; A – трехмерный оператор адвекции (переноса). Для эйлеровой модели в декартовой системе координат он имеет вид

$$A\varphi = u\frac{\partial \varphi}{\partial x} + v\frac{\partial \varphi}{\partial y} + w\frac{\partial \varphi}{\partial z}.$$

Оператор B представляет собой все остальные слагаемые системы уравнений без правых частей (градиент давления, сила Кориолиса). Такие операторы встречаются во многих задачах математической физики. Таким

образом, описываемые подходы к распараллеливанию моделей атмосферы могут быть применены и к другим проблемам.

В векторе правых частей $F = (F_u, F_v, F_T, F_q, 0)^T$ каждый компонент описывает источники и стоки соответствующей переменной вследствие процессов подсеточного масштаба (горизонтальная и вертикальная диффузия, коротковолновая и длинноволновая радиация, глубокая и мелкая конвекция, планетарный пограничный слой, торможение гравитационных волн). В обеих моделях слагаемое, описывающее внешнее воздействие на систему F, может быть вычислено независимо для каждой точки горизонтальной сетки, так как вычисление этого слагаемого в данной точке сетки зависит только от данной вертикальной колонны сетки. Здесь можно легко применить двумерное разбиение расчетной области в горизонтальной плоскости и достичь высокой степени параллелизма без необходимости обменов данными между процессорами. Вычисления правых частей ответственны за 53,3% времени CPU в эйлеровой модели и за 61% в полулагранжевой модели (при расчетах на одном процессоре). Главное затруднение в распараллеливании атмосферных моделей лежит в алгоритме интегрирования по времени дискретизированной системы уравнений (1). Это вызвано тем, что обе модели используют полунеявный алгоритм интегрирования по времени для быстрых гравитационных волн, чтобы увеличить шаг по времени. Это приводит к необходимости решения на каждом шаге по времени двумерных уравнений типа Гельмгольца на сфере. Параллельная реализация прямого алгоритма для решения этой проблемы рассматривается в разд. 2. Можно заметить, что решение уравнений эллиптического типа также часто встречается в задачах математической физики.

Для организации обменов данными между процессорами используются стандарт MPI (Massage Passing Interface – интерфейс передачи сообщений) и подход «одна программа – много данных» (SPMD), где головной процесс также организует ввод/вывод и некоторые дополнительные вычисления. В практических вычислениях применялись две параллельные вычислительные системы. Первая – это Linux-кластер с 18 двухпроцессорными узлами Intel Pentium III/500, соединенных через сеть SCI с пиковой пропускной способностью 88 Мбайт/с и временем задержки обменов 6 мкс поверх MPI. Этот кластер установлен в Научно-исследовательском вычислительном центре Московского государственного университета (в дальнейшем ПЭВМ-кластер). Вторая система – высокопроизводительная система МВС 1000М, основанная на процессорах Alpha21264A, 667 МГц, установленная в Межведомственном суперкомпьютерном центре в Москве. Она состоит из 384 двухпроцессорных узлов, соединенных через сеть Myrinet с пиковой

пропускной способностью 140 Мбайт/с и временем задержки 14 мкс поверх MPI. Пиковая производительность этой системы достигает 1 Тфлопс.

1. Модель климата

Эйлерова модель климата ИВМ РАН предназначена для изучения изменчивости и изменений климатической системы под влиянием различных искусственных факторов и природных явлений [1]. Так как модель необходимо интегрировать на длительные сроки (десятилетия и даже столетия) с различными начальными состояниями, численные эксперименты с моделью предъявляют высокие требования как к вычислительной системе, так и к параллельным алгоритмам модели.

В модели для дискретизации оператора A используются стандартные центральные разности второго порядке на смещенной сетке С. Эта дискретизация обозначена как A_h. Уравнение (1) без правых частей дискретизируется по времени следующим образом:

$$\frac{\varphi^{n+1} - \varphi^{n}}{2\Delta t} + A_h\varphi^{n} + \frac{1}{2}\left(L\varphi^{n+1} + L\varphi^{n}\right) + \left(N\varphi\right)^{n} = 0, \qquad (2)$$

где L – линейная часть оператора B, который ответственен за быстрые гравитационные волны, $L+N=B;$ верхний индекс означает номер шага по времени, Δt – шаг по времени.

Размер вычислительной области модели – 145x73 (2,5 и 2 градуса по долготе и широте соответственно) и 21 уровень по вертикали. Область разбивается по широте и долготе так, чтобы эти измерения были распределены между P_{lon} и P_{lat} процессорами соответственно. Решение системы уравнений (2) занимает 46,7 % времени счета однопроцессорного варианта, при этом примерно половина затрат связана с решением набора уравнений типа Гельмгольца, возникающих при решении неявной по времени части системы (2) .

Расчеты оператора адвекции A_h, нелинейного оператора N и последующие вычисления правой части R для уравнения Гельмгольца не имеют глобальных зависимостей в горизонтальной плоскости, за исключением нескольких особенностей возле полюсов. Вычисления в данной точке сетки (i, j, k) используют известные значения переменных на уровне времени n из области [i –2:i+2]x[j-2:j+2]x[1:K]. Здесь индексы i, j и k означают долготу, широту и вертикальный уровень соответственно; K – количество вертикальных уровней. Рис. 1 представляет шаблоны зависимостей поверхностного давления, температуры, компонент вектора

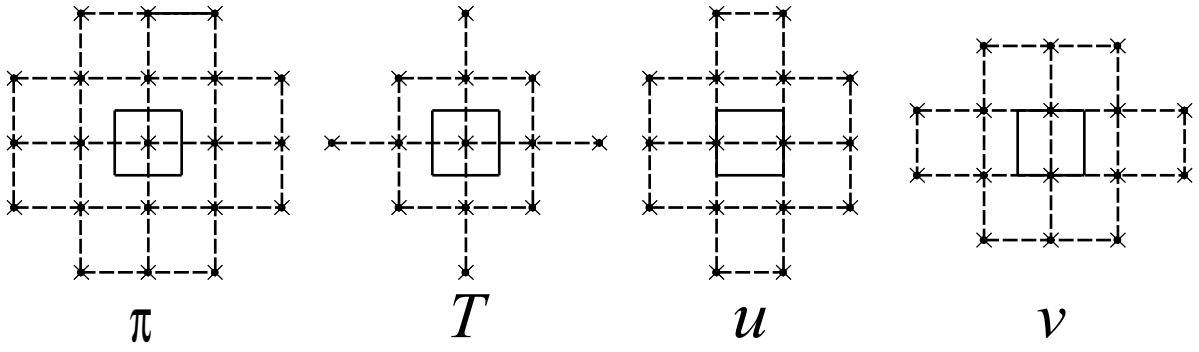

Рис. 1. Шаблоны зависимостей для вычисления правой части уравнения Гельмгольца

горизонтальной скорости *u* и *v*, от которых зависит значение правой части *R* в данной точке сетки.

Перед тем как эти вычисления начинаются, процессоры обменивают необходимые значения переменных на границах подобластей с соседними процессорами. Так же значения в первом и последнем узлах сетки по долготе пересылаются между первыми и последними процессорами разбиения по долготе, чтобы поддерживать периодические граничные условия по этой координате.

Как только явная часть динамики вычислена, решается неявная часть системы (2), сводящаяся к решению одного дискретного трехмерного уравнения типа Гельмгольца относительно одной переменной *D:*

$$D^{n+1} - (\Delta t)^2 G \nabla^2 D^{n+1} = R, \qquad (3)$$

где *D* – горизонтальная дивергенция на модельной σ-поверхности; *G* – матрица $K \times K$; ∇^2 – дискретный аналог горизонтального оператора Лапласа в сферических координатах; *R* объединяет все известные слагаемые системы (2) на уровнях времени *n* и *n-1*. Периодические граничные условия в (3) поддерживаются так же, как в системе (2). Диагонализирующее преобразование, примененное к матрице *G*, позволяет расщепить уравнение (3) в вертикальном направлении и решать его независимо для каждого вертикального уровня прямым методом, включающим быстрое преобразование Фурье по долготе и метод исключения Гаусса (прогонку) в меридиональном направлении. Алгоритм решения уравнения (3) имеет следующую структуру:

1. Преобразование правой части уравнения (3) в базис собственных векторов матрицы G.
2. Прямое быстрое преобразование Фурье.
3. Решение линейных трехдиагональных уравнений по широте.
4. Обратное быстрое преобразование Фурье.
5. Преобразование решения из базиса собственных векторов матрицы *G*.

Шаги 1 и 5 вычисляют с помощью матрично-векторного произведения по вертикальной координате, и они не требуют дополнительных обменов данными между процессорами. Шаги 2 и 4 требуют данных от всех точек по долготе для данной широты и вертикального уровня. Шаг 3, напротив, нуждается во всех значениях в точках сетки по широте для данных коэффициента Фурье по долготе и вертикального уровня.

Чтобы выполнить шаг 2, мы переставляем данные в плоскости «долгота-вертикальная координата», собирая данные по всем узлам по долготе и распределяя данные со всех вертикальных уровней между процессорами (T_φ , рис. 2). Эта операция называется транспонированием данных. По завершении быстрых преобразований Фурье каждый процессор содержит данные по всем долготным коэффициентам Фурье для части уровней и широт. Чтобы приступить к шагу 3, мы снова используем транспонирование, но в плоскости «широта-долгота». Теперь собираются

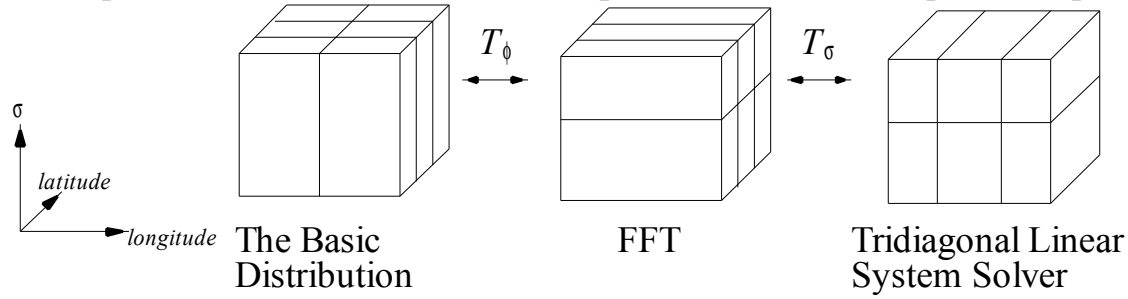

Рис. 2. Распределения данных, используемые при решении уравнения Гельмгольца (3) (пример для $P_{lon}=2$, $P_{lat}=3$)

данные по всем широтам, но распределяются они по долготным коэффициентам Фурье (T_σ, рис. 2). Получив решения трехдиагональных систем уравнений, мы повторно переупорядочиваем данные в исходное распределение, выполняя транспонирования в обратном порядке и вычисляя между ними обратное преобразование Фурье.

Тестирование параллельной реализации модели было выполнено как на вычислительной системе МВС 1000М, так и на ПЭВМ-кластере НИВЦ МГУ. Для данного числа процессоров P мы измерили время интегрирования модели на один шаг на всех сетках из (P_{lon}, P_{lat}) процессоров, таких, что $P_{lon}P_{lat}=P$. Результаты приведены в таблице. Параллельное ускорение определяется как отношение продолжительности вычисления на одном процессоре к минимальному времени, получаемому на P процессорах. Например, на 8 процессорах МВС 1000М мы тестировали сетки процессоров (1,8), (2,4), (4,2) и (8,1) и выбрали конфигурацию (2,4) как наилучшую. Время расчета одного шага по времени на одном процессоре – 11,4 с на МВС и 36,0 с на ПЭВМ-кластере. Чтобы изучить масштабируемость модели, мы также провели вычисления с горизонтальным разрешением 5 градусов по долготе и 4 градуса по широте. Полученное параллельное ускорение изображено на рис. 3 слева.

Время CPU динамического блока модели климата, на вычислительной системе МВС 1000М, с

P_{lon} / INM AGCM dynamics speedup	P_{lat} 1	2	4	8	16
1	11,39	5,97	3,56	2,62	2,08
2	6,62	4,56	2,60	1,74	1,78
4	4,90	3,18	1,70	1,49	0,93
8	4,01	2,64	1,30	0,97	0,96
16	4,24	2,56	1,24	1,58	1,05

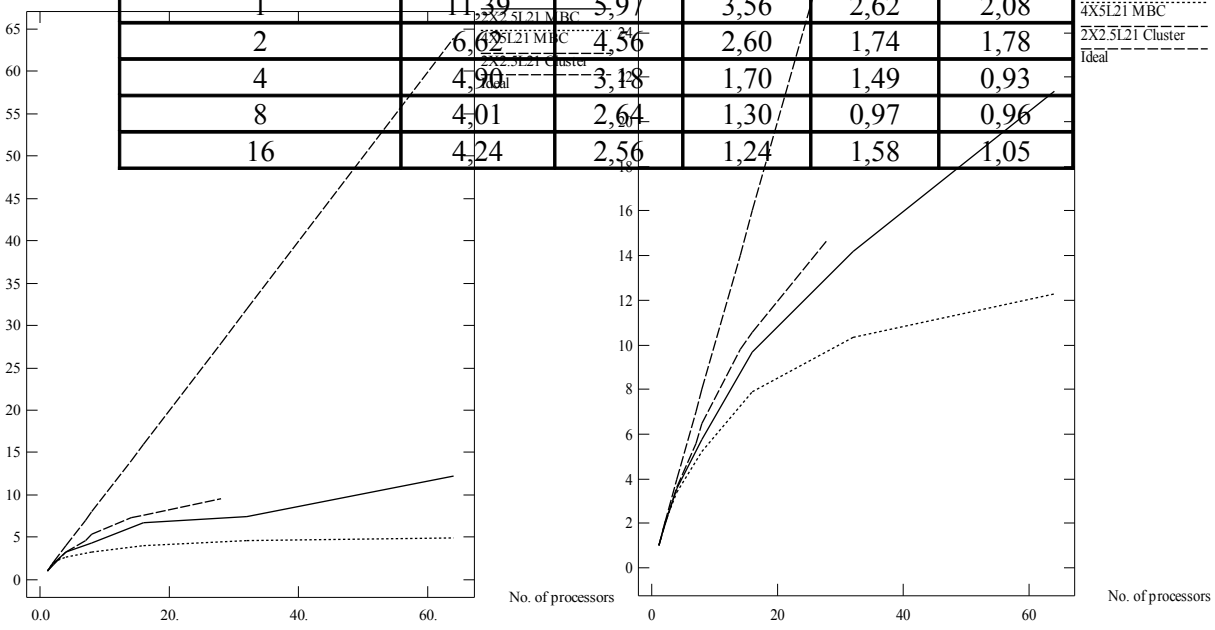

Рис. 3. Параллельное ускорение динамического блока модели климата (слева), экстраполированное ускорение для всей модели (справа)

Справа на рис. 3 показано экстраполированное параллельное ускорение для всей модели, включая учет параметризации процессов подсеточного масштаба, т.е. с расчетом правых частей системы (1). Параметризации не требуют дополнительных обменов данными между процессорами.

2. Модель прогноза погоды

Численный гидродинамический прогноз погоды с пространственным разрешением, необходимым для соответствующего описания конвективных и мезомасштабных процессов, является проблемой, которая требует огромных компьютерных ресурсов. Полулагранжев метод (обратный метод характеристик) для описания адвекции (переноса) позволяет использовать шаг по времени в несколько раз больше, чем определяемый условием Куранта. В этом случае оператор адвекции исчезает из дискретизированного уравнения (1), поскольку полная производная функции дискретизируется как производная вдоль траектории (см. [3]). Рассматриваемая модель подробно изложена в [4]. Отличительной особенностью этой модели является применение компактных конечных разностей четвертого порядка на несмещенной сетке для аппроксимации неадвективных слагаемых в сочетании с использованием вертикального компонента абсолютного вихря и горизонтальной дивергенции в качестве прогностических переменных модели.

Система (1) без правых частей дискретизируется с использованием двуслойной схемы по времени с экстраполяцией ветра и нелинейных слагаемых уравнений на уровень по времени n+1/2 как

$$\frac{\varphi^{n+1} - \varphi^{n^*}}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left(L\varphi^{n+1} + L\varphi^{n^*}\right) + \frac{1}{2}\left(\left(N\varphi\right)^{n+1/2} + \left(N\varphi\right)^{n+1/2^*}\right) = 0, \qquad (4)$$

где L – линейная часть оператора B из уравнения (1), ответственная за быстрые гравитационные волны, $L+N=B$; $(\,)^{n+1}$ – значение элементов соответствующего уравнения в конечной точке траектории на новом шаге времени; $(\,)^{n^*}$ – значение в соответствующей исходной точке (которое определяется трехмерной траекторией). Конечные точки траекторий всегда являются точками сетки, в то время как исходные точки чаще всего не совпадают с узлами сетки. Значения в исходных точках получают кубической интерполяцией, используя близлежащие точки сетки.

Неявная часть системы (4) решается аналогично модели климата, описанной в предыдущем разделе. Для этого соответствующая часть системы (4) сводится к дискретному трехмерному уравнению типа

Гельмгольца относительно одной переменной *D*. Это уравнение решается прямым методом с использованием быстрого преобразования Фурье по долготе и решения блочно-трехдиагональных линейных систем с блоками 2x2 по широте (обратите внимание, что в модели климата используется обычная прогонка). Необходимость использования обращения блочно-трехдиагональных матриц вызвана применением компактных разностей высокого порядка. Также правая часть для уравнения Гельмгольца

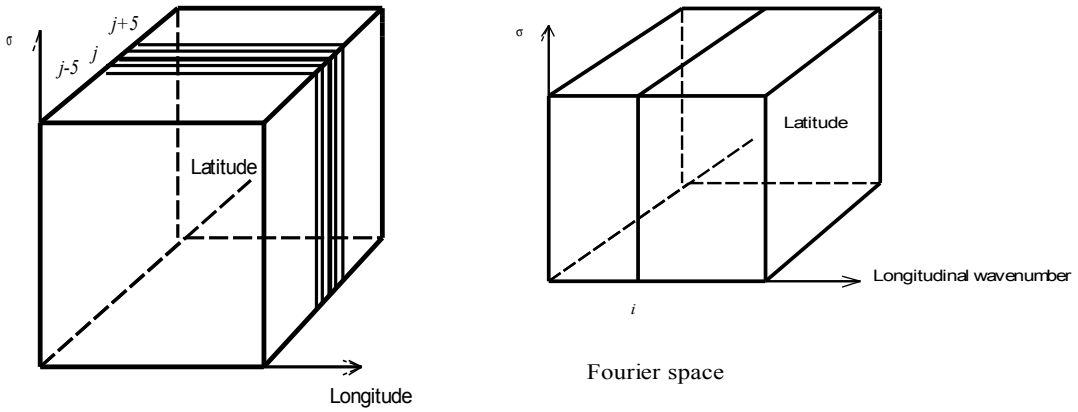

Рис. 4. Разбиение вычислительной области при вычислениях в сеточном пространстве (слева) и пространстве коэффициентов Фурье по долготе (справа)

вычисляется в пространстве коэффициентов Фурье по долготе.

Рассмотрим вычислительную структуру модели. Сначала вычисляют правые части уравнения (1), используя значения переменных состояния на уровне времени *n*. Эти правые части содержат тенденции прогностических переменных вследствие процессов подсеточного масштаба (солнечное излучение и т.д.). Здесь мы имеем высокую степень параллелизма, так как эти вычисления для данной точки сетки не требуют значений переменных в смежных точках сетки в долготном и широтном направлениях, требуются только значения в вертикальных столбцах. Следует заметить, что эти вычисления занимают 61 % всего времени расчета. Затем вычисляются операторы *L* на шаге по времени *n* и *N* на уровне *n+1/2* из (4). Эти вычисления для данной точки сетки (*i, j, k*) требуют значения переменных из области [*i-4:i+4*]×[*j-4:j+4*]×[*1:K*]. Увеличение горизонтального шаблона по отношению к модели климата, описываемой в предыдущем разделе, вызвано использованием компактных конечных разностей четвертого порядка для вычисления операторов вихря и дивергенции. Они реализованы с помощью приближенного обращения соответствующих

трехдиагональных операторов. Как и в модели климата, процессоры обмениваются необходимыми значениями переменных на границах подобластей с соседями перед тем, как эти вычисления начинаются. Там, где возможно, используются асинхронные обмены, что позволяет одновременно выполнять вычисления и обмены данными. Следующий этап вычислений – поиск исходных точек траекторий и интерполяция вычисленных слагаемых уравнений в эти точки. Эта часть ответственна за 30 % машинного времени. Шаблон интерполяции составляет 4 точки по каждой координате. Исходная точка траектории может лежать за несколько интервалов сетки от конечной точки (которая всегда является точкой сетки в полулагранжевом методе). Максимальная ширина области зависимости вычислений для данной точки сетки зависит от размера шаблона, значения шага по времени и максимальной скорости ветра в атмосфере (около 110 м/с). Типичная половинная ширина области зависимости в нашей модели для горизонтального разрешения 1,5 градуса составляет 5 точек в каждом горизонтальном направлении. Таким образом, количество данных, которое передается между процессорами, существенно выше, чем для модели климата.

Для вычислительной системы со значительным временем задержки представляется выгодным ограничиться одномерным разбиением вычислительной области так, чтобы каждый процессор выполнял вычисления в некоторой полосе широт (рис. 4). Очевидно, что двумерное разбиение является более общим и позволяет использовать большее количество процессоров. Однако это также приводит к большему количеству обменов данными между процессорами, когда количество процессоров относительно мало. Кроме того, двумерное разбиение требует двух прямых и обратных транспонирований данных для решения уравнения Гельмгольца, как было описано в разд. 1, в то время как одномерное разбиение требует только одной пары транспонирований.

Нам необходимо переместить данные из долготных рядов, которые размещаются в других процессорах. Необходимые ряды переносятся после того, как завершаются все вычисления величин на уровнях времени n и n+1/2.

После того как интерполяции и прямые быстрые преобразования Фурье по долготе заканчиваются, нам необходимо перераспределить данные для вычислений в пространстве коэффициентов Фурье по долготе. Вычисления для каждого коэффициента требуют значения всех широт (см. рис. 4), так что нам нужно обеспечить каждый процессор соответствующими данными, используя их транспонирование.

Вычисления в пространстве Фурье включают вычисление правой части и решение уравнения типа Гельмгольца (3), неявной горизонтальной диффузии четвертого порядка и вычисления горизонтальных компонент вектора скорости из дивергенции и завихренности. Эти вычисления выполняются параллельно для каждого коэффициента Фурье. После вычислений в пространстве Фурье нам нужно снова перераспределить данные между процессорами, так как для выполнения обратного преобразования Фурье по долготе нужны все коэффициенты.

С горизонтальным разрешением 1,5 градусов по широте модель теоретически может использовать до 120 процессоров. Однако это будет требовать большого количества обменов данными между процессорами, поскольку необходимые данные будут размещены не только в соседних процессорах, но и в следующих за ними. Практически для упомянутого разрешения можно использовать до 24 процессора.

Тестовые расчеты с количеством процессоров от 1 до 16 проводились на ПЭВМ-кластере и системе МВС 1000М с тремя разрешениями модели: 2 градуса по долготе и широте с 20 вертикальными уровнями, 1,5 градуса с 20

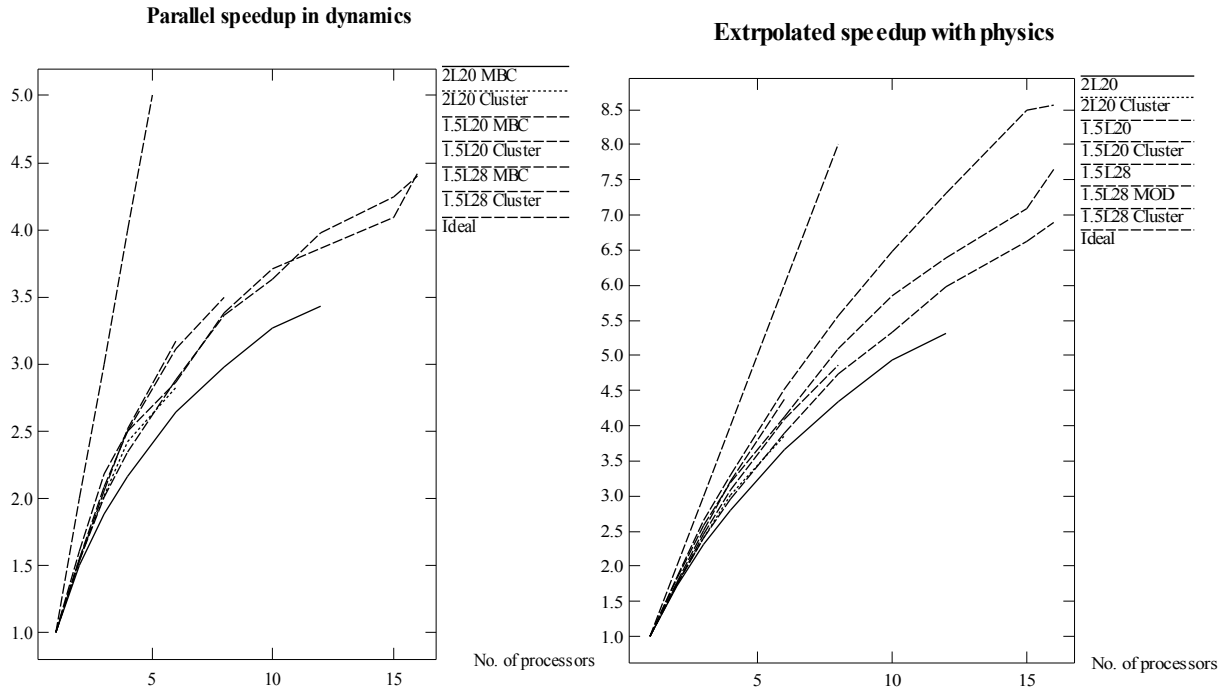

Рис. 5. Параллельное ускорение модели прогноза погоды: ускорение динамики (слева), экстраполированное ускорение всей модели с расчетом правых частей уравнений для различных разрешений модели (справа)

уровнями и 1,5 градуса с 28 уровнями. Параллельное ускорение динамики модели прогноза погоды на ПЭВМ-кластере и системе МВС 1000М представлено на рис. 5 слева. Правая панель рис. 5 показывает теоретическое параллельное ускорение, экстраполированное для всей модели с расчетом правых частей системы (1), т.е. с параметризациями процессов подсеточного масштаба. Кривая 1.5L28 MOD на правой части рис.5 показывает наилучшие результаты (параллельное ускорение 8,5 на 15 процессорах) и получена при оптимизации обменов на МВС 1000М.

Из этого рисунка можно сделать два вывода. Во-первых, эффективность распараллеливания возрастает с увеличением разрешения модели (т.е. размера вычислительной области) на обеих вычислительных системах. Это объясняется уменьшением влияния времени задержки обмена. Во-вторых, параллельная эффективность ПЭВМ-кластера несколько выше, чем системы МВС 1000М. Это вызвано двумя причинами. Первой причиной является большее значение времени задержки обмена на МВС 1000М (14 мкс по сравнению с 6 на ПЭВМ-кластере). Вторая причина состоит в том, что отношение времени получения одного результата процессором к пропускной способности сети на МВС 1000М в 1,6 раза больше, чем на ПЭВМ-кластере. Это означает, что процессор может произвести больше результатов на протяжении времени, требуемого для того, чтобы перенести один результат вычислений между процессорами и ждать завершения обменов. Частично эта проблема решена благодаря использованию асинхронных обменов между процессорами, но на этапе транспонирования данных возможность применения таких обменов ограничена.

Выводы

Модели климата и прогноза погоды ИВМ РАН были реализованы на параллельных компьютерах с распределенной памятью. Результаты указывают на преимущество использования параллельных вычислений в этих задачах. Примененные подходы к распараллеливанию моделей можно использовать и для других задач математической физики.

Полученные параллельные ускорения моделей, будучи еще далеки от идеала, являются разумными и допускают усовершенствование. Улучшение разрешения моделей повышает эффективность распараллеливания. Ведутся работы по оптимизации обменов и вычислительных алгоритмов, включающие адаптацию алгоритма транспонирования данных к конкретной вычислительной системе с использованием асинхронных обменов. Также может быть полезным сравнение полунеявных и явных схем интегрирования по времени.

Для модели прогноза погоды настоящая параллельная реализация не позволяет использовать большое количество процессоров. Ведутся работы по изучению различных возможностей реализации двумерного разбиения расчетной области без ухудшения эффективности распараллеливания при небольшом числе процессоров.

Наконец, можно обратить внимание, что современные атмосферные модели применяют все более совершенные и вычислительно-емкие алгоритмы для расчета компонентов вектора правых частей в уравнении (1). Это означает, что эффективность распараллеливания моделей в дальнейшем будет расти без дополнительных усилий, так как вычисления правых частей не требуют дополнительных обменов между процессорами.

Список литературы

1. *Алексеев В.В., Володин Е.М., Галин В.Я., Дымников В.П., Лыкосов В.Н.* Моделирование современного климата с использованием атмосферной модели ИВМ РАН. Описание модели А5421 (версия 1997 г.) и результаты экспериментов по программе AMIP II. М.: Институт вычислительной математики РАН, 1998. – 200 с. Деп. в ВИНИТИ 03.07.98 N 2086–В98.
2. *Kumar V., Grama A., Gupta A., Karypis G.* Introduction to Parallel Computing: Design and Analysis of Algorithms. Benjamin/Cummings Publ., California (USA), 1994.
3. *Staniforth A., Cote J.* Semi-Lagrangian integration schemes for atmospheric models. A review //Mon. Weather Rev. – 1991. – N119. – P. 2206-2223.
4. *Толстых М.А.* Полулагранжева модель атмосферы с высоким разрешением для численного прогноза погоды //Метеорология и гидрология. – 2001. – № 4. – С. 5-16.