Повышение масштабируемости программного комплекса модели Земной системы высокого пространственного разрешения

Е.В. Мортиков

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова

В работе рассматривается задача повышения масштабируемости климатических моделей на современных вычислительных системах при переходе к горизонтальному разрешению менее 1 градуса. Повысить эффективность параллельной реализации предлагается за счет выполнения вычислений, связанных с переносом аэрозолей на отдельных подмножествах процессоров и применения итерационных методов на основе многосеточного подхода для решения эллиптического уравнения, возникающего при использовании полунеявных схем аппроксимации уравнений гидротермодинамики по времени в модели атмосферы. В работе также исследуется возможность ускорения расчетов за счет использования архитектуры гетерогенных вычислительных кластеров, состоящих из центральных процессоров и ускорителей.

1. Введение

Развитие климатических моделей на сегодняшний день связано как с уточнением используемых физических параметризаций, так и с повышением пространственного разрешения при фиксированных методах аппроксимации уравнений гидротермодинамики. Численные эксперименты [6-8] показывают, что увеличение горизонтального разрешения до 0.25 градуса в моделях атмосферы и 0.1 градуса для моделей Мирового океана позволяет существенно повысить точность моделируемых характеристик крупномасштабных циркуляций. При этом динамика морского льда, процессы перемешивания в океане, мелкомасштабная динамика атмосферы чувствительны к горизонтальному разрешению моделей Земной системы. Увеличение вертикального разрешения в моделях также значимо для климатических исследований. В частности, эксперименты [2] с моделью общей циркуляции атмосферы Института вычислительной математики РАН с 80 расчетными уровнями по вертикали позволили воспроизвести квазидвухлетние колебания зонального ветра в экваториальной стратосфере близкие к наблюдаемым. По этим причинам воспроизведение климата при высоком пространственно-временном разрешении представляет значительный интерес (например, можно отметить планируемую программу сравнения моделей высокого разрешения HighResMIP в рамках CMPI6 – Climate Model Intercomparison Project).

Численное моделирование климата Земли относится к задачам наиболее требовательным к вычислительным ресурсам. Возможность проведения экспериментов с высоким пространственным разрешением напрямую связана с эффективностью программной реализации климатической модели и ее масштабируемостью на современных параллельных вычислительных системах. В настоящей работе задача разработки программного комплекса модели Земной системы высокого пространственного разрешения рассматривается на основе климатической модели ИВМ РАН, включающей модель общей циркуляции атмосферы и океана, химии атмосферы и углеродного цикла. Климатическая модель участвовала в международных проектах CMIP по сравнению совместных моделей атмосферы и океана, а результаты моделирования вместе с данными других моделей использовались при составлении отчетов МГЭИК (Межправительственная группа экспертов по изменению климата) [1].

2. Постановка задачи

Для исследования эффективности параллельной реализации программного комплекса модели Земной системы были проведены эксперименты при последовательном увеличении горизонтального разрешения и увеличении числа вертикальных уровней (в модели атмосферы раз-

решение изменялось от 2 до 0.25 градусов, число уровней от 21 до 128). Вычислительные эксперименты проводились на суперкомпьютере «Ломоносов» МГУ и кластере «МВС-10П» МСЦ РАН. Результаты свидетельствуют о том, что для ускорения расчетов и повышения масштабируемости при переходе к высокому пространственному разрешению необходима существенная модификация динамического блока модели атмосферы. На рисунке 1 показано ускорение при увеличении числа ядер до 2000 для расчета общей циркуляции атмосферы при горизонтальном разрешении в 1 градус. В этом случае программная реализация позволяет задействовать не более 200-500 ядер в зависимости от числа вертикальных уровней.

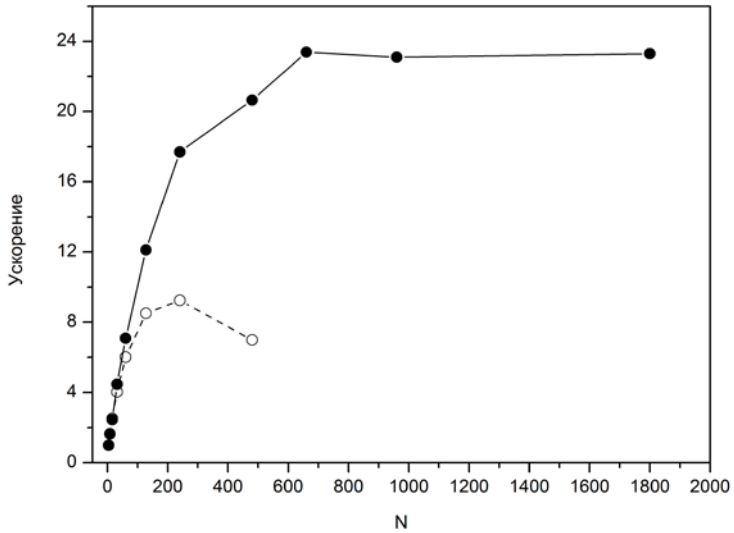

Рис. 1. Ускорение модели атмосферы относительно времени счета на 4 вычислительных ядрах при горизонтальном разрешении в 1 градус. Сплошная линия соответствует версии модели при 128 вертикальных уровнях, пунктирная – при 21 уровне. N – число вычислительных ядер.

С учетом увеличения шага по времени при увеличении пространственного разрешения до 0.25 градуса необходимо ускорение расчетов в 4-8 раз. Такой результат представляется достижимым за счет повышения масштабируемости модели атмосферы при модификации отдельных блоков и разработке алгоритмов, использующих особенности архитектуры современных вычислительных систем. На рисунке 2 показана доля различных компонент модели атмосферы от общего времени счета.

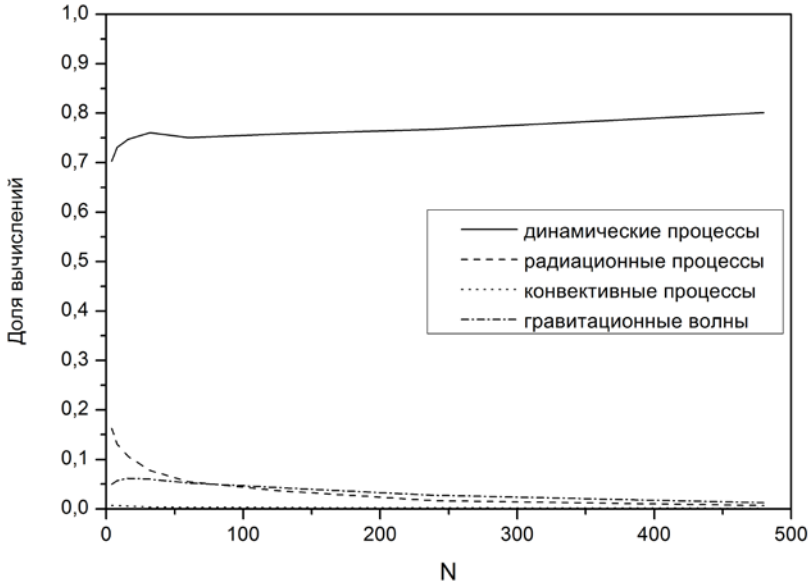

Рис. 2. Доля различных элементов модели атмосферы относительно общего времени счета при увеличении числа N вычислительных ядер. Горизонтальное разрешение – 1 градус, число уровней по вертикали – 21.

Основное время вычислений при увеличении числа задействованных ядер приходится на расчет динамики – интегрирование по времени уравнений термогидродинамики и решение дополнительных уравнений переноса примесей. При этом наиболее трудоемким элементом является численное решение эллиптического уравнения на каждом шаге по времени.

3. Модификация программной реализации модели атмосферы

Описание динамики примесей в модели атмосферы представляет набор уравнений переноса, записанных для концентраций различных химических компонент. Увеличение числа рассматриваемых в современных климатических задачах атмосферных примесей, усложнение их описания требуют и ускорения расчета дополнительных уравнений. В этой связи был реализован следующий подход – выделение блока переноса примесей в программный модуль, выполняемый на отдельном подмножестве вычислительных ядер. Такой подход согласуется с общей методикой представления компонентов модели Земной системы в виде программных модулей [5]: модуль атмосферы, модуль океана, модуль морского льда и т.д. Для организации обменов данными межу основной моделью атмосферы и блоком переноса примеси был реализован набор подпрограмм, позволяющий в частности проводить обмены асинхронно с возможностью буферизации сообщений. Последнее дает возможность существенно уменьшить число точек синхронизации при расчете основной динамики атмосферы. Реализованный подход за счет увеличения числа задействованных ядер в два раза позволяет ускорить блок динамики атмосферы до двух раз даже при относительно небольшом числе атмосферных примесей (рассматривается десяти компонентная примесь). Оценки показывают, что ускорение в расчетах в большей степени достигается за счет уменьшения доли вычислений, предполагающих выполнение операций объединения данных с параллельных процессов (в частности – фильтрацию решения). Стоит отметить, что программная реализация в случае дальнейшего увеличения числа атмосферных примесей допускает разделение компонент на группы и последующего численного решения каждой группы уравнений на отдельных вычислительных ядрах.

Для аппроксимации по времени в модели атмосферы используется полунеявная схема, основанная на выделении линейных членов, связанных с распространением гравитационных волн. Применение полунеявного подхода позволяет значительно ослабить ограничение на шаг по времени по сравнению с явной схемой, однако приводит к необходимости решения эллиптического уравнения на каждом шаге. Трехмерное уравнение за счет метода разделения переменных сводится к решению двумерных уравнений на каждом модельном уровне. Дискретное уравнение при этом решается за счет преобразования Фурье вдоль кругов широты и последующего обращения трехдиагональных матриц. Проведенные эксперименты по оценке масштабируемости модели атмосферы свидетельствуют о том, что данный алгоритм, требующий объединения данных вдоль каждой из пространственных координат, неэффективен для расчета на параллельных архитектурах. В этой связи рассматривалась возможность решения систем уравнений, возникающих при дискретизации указанных эллиптических уравнений, с помощью предобусловленных итерационных методов градиентного типа. Оценки на основе численных экспериментов свидетельствуют о достижении быстрой сходимости для высоких вертикальных уровней даже с простейшими предобуславливателями (метод Якоби, метод последовательной верхней релаксации) за счет усиления диагонального преобладания матрицы системы. На нижних уровнях свойства матрицы системы определяются оператором Лапласа, а наблюдаемая сходимость ухудшается в особенности при увеличении горизонтального разрешения. Для ускорения сходимости в качестве предобуславливателя предлагается использовать многосеточный метод. Основной проблемой при этом является сильная анизотропия вычислительной сетки вблизи полюсов и усиление данного эффекта при переходе к огрубленной как по долготе, так и по широте сетке. В реализованном многосеточном методе используется следующий подход к построению грубой сетки [4] – увеличение шага вдоль кругов широты в сочетании с условным огрублением вдоль меридианов вблизи экватора. Ширина огрубления вдоль меридианов при этом увеличивается при переходе на наиболее грубые сетки и оценивается по величине внедиагональных элементов матрицы. В этом случае для сглаживания ошибки в многосеточном методе используется точечный метод Гаусса-Зейделя для красно-черного упорядочивания узлов сетки. Данный подход представляется наиболее эффективным для параллельных архитектур, в

отличие от альтернативы «разрешения» анизотропии в многосеточном методе при дискретизации на сфере – применения линейных итерационных методов, предполагающих обращение трехдиагональных систем [3]. Использование многосеточного метода в качестве предобуславливателя позволило значительно сократить число итераций при решении систем на нижних уровнях, даже при неполном огрублении вычислительной сетки. Последнее представляется важным для повышения масштабируемости модели атмосферы, поскольку уменьшает число необходимых операций объединения данных на процессорах при огрублении сетки. При последовательном решении двумерных эллиптических уравнений на каждом модельном уровне и увеличении числа задействованных вычислительных ядер, доля времени инициализации обменов данными становиться существенной. По этой причине итерационный метод применяется для решения блочнодиагональных систем, совмещающих независимые двумерные системы на нескольких уровнях. Число блоков в каждой подзадаче оценивается по величине диагональных компонент, что обеспечивает близость числа итераций достаточных для сходимости и позволяет объединить обмены для нескольких уровней.

Актуальной задачей является исследование возможности использования ускорителей, в частности графических процессоров, как элементов современных вычислительных систем для расчета климатических задач. Наибольший интерес в связи со сложностью многокомпонентных климатических моделей представляет ускорение расчета отдельных блоков модели – выполнении локальных вычислений на архитектуре графических процессоров. К основным проблемам, возникающим при использовании гибридных вычислительных кластеров можно отнести: необходимость в дополнительных операциях копирования памяти в связи с ее неоднородностью и решение задачи равномерного распределения вычислений с учетом архитектуры современных суперкомпьютеров, предполагающей совмещение нескольких устройств-сопроцессоров и центрального процессора на одном вычислительном узле. Например, вычислительный узел суперкомпьютера «Ломоносов» представляет собой объединение двух 4-х ядерных процессоров Intel Xeon E5630 2.53 ГГц и двух графических карт Nvidia Tesla X2070.

Полученные в работке оценки свидетельствуют о том, что для итерационного метода решения эллиптического уравнения, выполнение вычислений на архитектуре графических процессоров позволяет ускорить расчеты. В данном случае за счет разделения переменных, и, как следствие, независимости систем уравнений на различных вертикальных уровнях удается перекрыть дополнительные «медленные» операции пересылки данных между центральным процессором и сопроцессором с нахождением решения дискретного двумерного эллиптического уравнения. Однако совмещение в современных вычислительных системах 4-х ядер центрального процессора и одной графической карты требует объединения данных с различных параллельных процессов для задания правой части системы в памяти ускорителя. Более того, вычислительные ресурсы в такой схеме используются неэффективно – ядра центрального процессора остаются практически незадействованными. Схемы использования всех устройств вычислительного узла приводят к увеличению количества дополнительных операций копирования памяти и обменов между параллельными процессами, что значительно снижает производительность. В этой связи интерес представляет перспективная архитектура массивно-параллельных систем (например, RSC PetaStream), использующих многоядерную архитектуру на основе сопроцессоров в качестве основного вычислительного элемента.

4. Заключение

В работе проведено исследование масштабируемости модели Земной системы при высоком пространственном разрешении. Для повышения эффективности параллельной реализации модели общей циркуляции атмосферы проведена оптимизация блока переноса примеси модели атмосферы и реализован итерационный метод решения дискретного эллиптического уравнения, возникающего за счет применения полунеявных схем аппроксимации уравнений термогидродинамики по времени. Новая программная реализация блока переноса примеси и применение итерационного метода для решения эллиптического уравнения позволили повысить эффективность расчета динамики атмосферы при высоком горизонтальном разрешении. При этом даже для относительно грубого разрешения модели атмосферы (около 1 градуса) реализованные подходы дают возможность задействовать до 2×10^3 вычислительных ядер в расчетах.

В работе также исследовалась возможность реализации отдельных компонент эйлеровой модели атмосферы на гетерогенных вычислительных кластерах, состоящих из центральных процессоров и ускорителей. На примере итерационного метода решения эллиптического уравнения показано, что выполнение вычислений на архитектуре графических процессоров позволит уменьшить время расчета.

Оценка эффективности параллельной реализации модели при дальнейшем увеличении числа ядер связана с необходимостью определения точности приближения к решению эллиптического уравнения достаточной для климатических задач. Дальнейшая работа предполагает оптимизацию параллельной реализации многосеточного метода и построение эффективных методов сглаживания при дискретизации уравнений на сфере, учитывающих особенности архитектуры современных вычислительных систем.

Литература

1. Дымников В.П., Лыкосов В.Н., Володин Е.М., Галин В.Я., Глазунов А.В., Грицун А.С., Дианский Н.А., Толстых М.А., Чавро А.И. Моделирование климата и его изменений. – В: «Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования» М.: Наука, 2005. Т. 2. С. 38-175.
2. Кулямин Д.В., Володин Е.М., Дымников В.П. Моделирование квазидвухлетних колебаний зонального ветра в экваториальной стратосфере // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2009. № 1. С. 43-61.
3. Barros S.R.M. Multigrid methods for two- and three-dimensional Poisson-type equations on sphere // J. Comp. Phys. 1991. V. 92, N 2. P. 313-348.
4. Buckeridge S., Scheichl R. Parallel geometric multigrid for global weather prediction // Numerical Linear Algebra with Applications. 2010. V. 17. P. 325-342.
5. Collins N., Theurich G., DeLuca C., Suarez M., Trayanov A., Balaji V., Li P., Yang W., Hill C., da Silva A. Design and implementation of components in the Earth System Modeling Framework // Int. J. of High Perform. Comp. App. 2005. V. 19, N 3. P. 341-350.
6. Demory M.-E., Vidale P.L., Roberts M.J., Berrisford P., Strachan J., Schiemann R., Mizielinski M.S. The role of horizontal resolution in simulating drivers of the global hydrological cycle // Clim. Dyn. 2014. V. 42. P. 2201-2225.
7. Roberts M.J., Clayton A., Demory M.-E. et al. J. Impact of resolution on the Tropical Pacific Circulation in a matrix of coupled modes // J. Climate. 2009. V. 22. P. 2541-2556.
8. Shaffrey L.C., Stevens I., Norton W.A. et al. U.K. HiGEM: the new U.K. High-Resolution Global Environment Model – model description and basic evaluation // J. Climate. 2009. V. 22. P. 1861-1896.