

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ WRF

Анотація. Досліджені можливості застосування алгоритмів розпаралелення для підвищення швидкодії метеорологічної моделі WRF. Теоретично й експериментально досліджені можливості алгоритму розпаралелення обчислень по областях. Представлена автоматична система паралельних розрахунків незалежних метеорологічних сценаріїв.

Ключові слова: метеорологічна модель, паралельні обчислення, менеджер управління завданнями.

Аннотация. Исследованы возможности применения алгоритмов распараллеливания для повышения быстродействия метеорологической модели WRF. Теоретически и экспериментально исследованы возможности алгоритма распараллеливания вычислений по областям. Представлена автоматическая система параллельного расчета независимых метеорологических сценариев.

Ключевые слова: метеорологическая модель, параллельные вычисления, менеджер управления заданиями.

Abstract. Capabilities of parallel algorithms for improving efficiency of the meteorological model WRF are investigated. The method of domain decomposition is studied theoretically and experimentally. An automated system of parallel calculation of independent meteorological scenarios is presented.

Key words: meteorological model, parallel computations, workload manager system.

1. Введение

В последние годы мезомасштабные метеорологические модели все чаще используются для решения разнообразных практических задач, требующих детальных оценок метеорологических полей. Например, в работе [1] разработана оперативная прогностическая система на базе использования свободно распространяемой через Интернет мезомасштабной метеорологической модели WRF [2]. Эта система применяется в задачах реагирования на паводки, для моделирования изменений регионального климата в Украине и во многих других ситуациях [3]. Несмотря на огромное увеличение вычислительных мощностей в последние годы, вопрос о повышении вычислительной эффективности метеорологических моделей остается открытым. Это связано с чрезвычайно широким спектром атмосферных движений и, как следствие, ростом требований к пространственному разрешению метеорологических моделей. Например, в работе [3] было показано, что только расчеты с горизонтальным пространственным разрешением не меньше 3 км позволили правильно воспроизвести осадки в Закарпатье, приведшие к катастрофическому паводку в июле 2008 г. Поскольку в модели WRF используются явные схемы аппроксимации горизонтальных операторов, время расчетов зависит от горизонтального шага сетки при условии, что вертикальный шаг остается неизменным, как $T \sim 1 | h^3 \sim N^3$, где h – горизонтальный шаг модели, а N – общее число вычислительной сетки. Отсюда понятно, что требования к вычислительным ресурсам очень быстро увеличиваются при уменьшении шага сетки. Данное затруднение может быть преодолено с использованием алгоритмов параллельных вычислений.

Известной сложностью использования этого пути является увеличение количества операций обмена данными при росте количества процессоров, что приводит к известному эффекту насыщения. Поэтому существует необходимость получения оценок того, какой максимальный коэффициент ускорения за счет распараллеливания может быть достигнут в конкретной задаче и какое максимальное количество вычислительных узлов может потребоваться для достижения максимальной эффективности. В данной работе проведено тео-

ретическое и экспериментальное исследование, позволяющее частично ответить на поставленный вопрос.

С другой стороны, при наличии большого количества вычислительных узлов (в составе вычислительного кластера или в сети ГРИД) они могут быть эффективно использованы в случае, когда возникает необходимость пересчета большого количества независимых расчетных сценариев [4]. Для этого требуется разработать систему автоматизированного запуска расчетов WRF на имеющихся узлах. Разработке такой системы посвящена данная работа.

2. Разбиение вычислений по областям

В модели WRF применяется алгоритм разбиения вычислений по областям. Поскольку численные схемы, используемые в этой модели, явные по горизонтали и неявные по вертикали, вычислительная область разбивается вертикальными плоскостями на подобласти (рис. 1). Разбиение может осуществляться как перпендикулярными (случай,

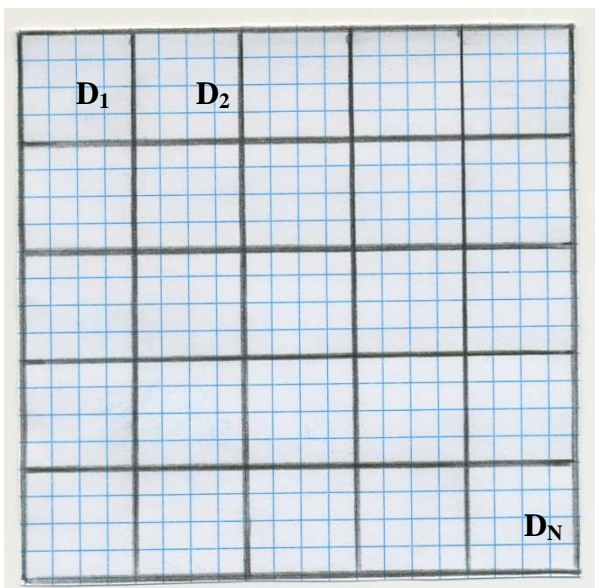


Рис. 1. Разбиение кубической вычислительной области на подобласти (вид сверху). Толстые линии обозначают границы подобластей. Пересечения тонких линий показывают узлы расчетной сетки. В данном случае количество ячеек вдоль одной из сторон $N = 20$, количество делений на подобласти вдоль одной из сторон $p = 5$

показанный на рис. 1), так и параллельными плоскостями (для этого случая на рис. 1 следует убрать границы вдоль одного из направлений).

На каждом новом временном шаге значения в каждом внутреннем узле каждой подобласти (пересечения тонких линий на рис. 1) зависят только от значений в узлах, принадлежащих той же подобласти. Однако перед началом каждого нового временного шага процессу, ответственному за вычисления в данной подобласти, должны быть переданы значения переменных в граничных узлах (границы подобластей показаны на рис. 1 толстыми линиями).

Исходя из описанного алгоритма, исследуем зависимость количества процессов насыщения, а также максимального коэффициента повышения быстродействия от количества узлов сетки при разбиении области перпендикулярными плоскостями. Для простоты исследуем случай квадратной (в горизонтальной проекции) области, которая разбивается на подобласти с помощью проведения равного количества вертикальных сечений вдоль оси x и вдоль оси y (как на рис. 1). Пусть первоначально количество узлов вдоль каждой из осей x , y равно N , а количество сечений, которое проводится для разбиения на подобласти, – p . Например, в случае, показанном на рис. 1, $N = 20$, $p = 5$.

При увеличении количества подобластей растет число узлов n_e , находящихся на границе между подобластями, в которых требуется производить обмен информацией. Действительно, количество подобластей равно p^2 , а количество узлов вдоль периметра каждой из областей равно $4N/p$. Таким образом, общее количество граничных узлов, в которых требуется производить обмен, равно $n_e = (4Np^2/p - 4N) = 4N(p-1)$. Из общего

количества граничных узлов вычтены $4N$ узлов, расположенных вдоль внешней границы, в которых обмен не производится.

Пусть время, необходимое для обмена информацией в одном узле, равно T_e . Тогда общее время, затрачиваемое на обмен при рассматриваемом делении на подобласти, равно $4T_e(p-1)$.

Пусть время, затрачиваемое на вычисления в одном узле, равно T_i . Количество узлов, в которых проводятся вычисления, неизменно и равно $N^2 - 4N$ (исключены узлы вдоль внешней границы). Однако при разбиении на p^2 подобластей это время уменьшается пропорционально количеству подобластей и, соответственно, оно равно $N(N-4)T_i/p^2$.

Складывая время, затрачиваемое на обмен данными с граничными узлами, и время вычислений, получаем общее время при независимом расчете в p^2 подобластях:

$$T = 4NT_e(p-1) + N(N-4)T_i/p^2. \quad (1)$$

Минимальное значение T получается при $4NT_e - 2N(N-4)T_i/p^3 = 0$ и, соответственно, наилучшее p , при котором достигается наибольшее ускорение $p_{\max} = ((N-4)T_i/(2T_e))^{1/3}$. Таким образом, наиболее эффективное количество независимых процессов L_{\max} (количество процессов насыщения):

$$L_{\max} = p_{\max}^2 \sim N^{2/3} \sim M^{1/3}. \quad (2)$$

Здесь M – общее число узлов, которое, без ограничения общности, можно считать $\sim N^2$ (число узлов по вертикали предполагается фиксированным). Подставляя полученное выше выражение для p_{\max} в общее выражение для T , получим, что наименьшее время $T_{\min} \sim N^{4/3}$.

Введем коэффициент ускорения $K = T_0/T$, где $T_0 = T_i(N^2 - 4N)$ – время вычислений без распараллеливания. Тогда, из изложенного выше, максимальный коэффициент повышения быстродействия за счет распараллеливания

$$K_{\max} = T_0/T_{\min} \sim N^{2/3} \sim M^{1/3}. \quad (3)$$

Отметим, что исследованное выше разбиение на подобласти перпендикулярными плоскостями (одновременно в двух направлениях) принципиально отличается от разбиения параллельными плоскостями (ориентированными в одном направлении). Действительно, повторяя приведенные рассуждения, получим, что общее время вычислений в случае разбиения параллельными плоскостями $T = 2N(p-1)T_e + T_i N(N-4)/p$, а коэффициенты ускорения

$$L_{\max} = p_{\max} \sim N^{1/2}, K_{\max} \sim N^{1/2} \sim M^{1/4}. \quad (4)$$

То есть, максимальный коэффициент повышения эффективности расчетов растет с ростом количества узлов медленнее при разбиении на подобласти параллельными плоскостями, чем при разбиении взаимно перпендикулярными плоскостями.

3. Результаты расчетов

Для тестирования использовались следующие конфигурации модели WRF.

А. Базовая конфигурация с двумя вложенными областями. Первая, объемлющая, область имеет размер 37×37 узлов с шагом сетки 81 км; вторая, рабочая, область имеет размер

73x73 узла с шагом сетки 27 км. Обе области полностью покрывают территорию Украины.

Б. Конфигурация с третьей вложенной областью, границы которой максимально приближены к границам второй области, и с горизонтальным пространственным разрешением 9x9 км, 181x181 узлов.

Параллельная версия модели WRF работает в пилотном режиме на вычислительном кластере ИПММС НАН Украины. Кластер состоит из 4 узлов, на каждом из которых установлено два 4-ядерных процессора Intel(R) Xeon(R) CPU E5405, 2,00Ghz и 16 Гб

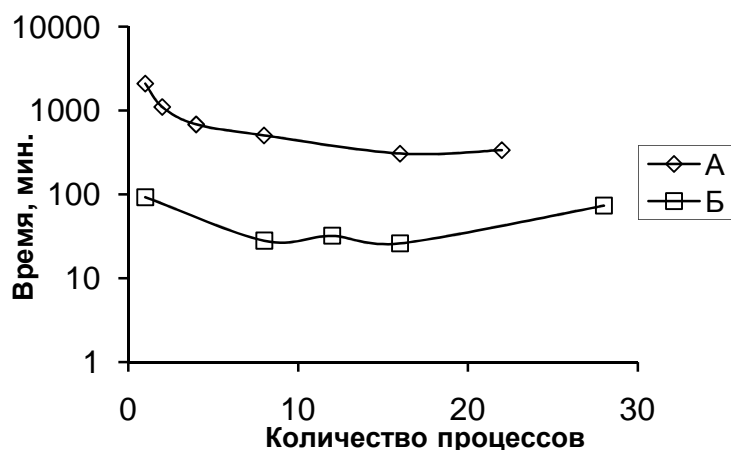


Рис. 2. Зависимость времени 168 ч прогнозов модели WRF от количества процессов: для конфигурации с двумя вычислительными областями (сверху) и с тремя вычислительными областями (снизу)

оперативной памяти. Операционная система – Linux Fedora Core 8. Для компиляции модели использовались Intel(R) MPI Library 3,2 for Linux, Intel Fortran Compiler 11,0, Intel C++ Compiler 11,0.

На рис. 2 представлены зависимости времени расчетов 168 ч прогнозов для конфигураций А и Б. Как видно из рисунка, в случае конфигурации А насыщение происходит для 8 процессов. При этом максимальное достигнутое ускорение распараллеливания – в 3,5 раз. В

случае конфигурации Б с тремя вычислительными областями (и, соответственно, с большим количеством вычислительных узлов) насыщение происходит при 16 процессах, а максимальный коэффициент ускорения за счет распараллеливания равняется 6,8 для WRF.

Поскольку в конфигурации Б количество узлов приблизительно в 7 раз больше количества узлов в случае конфигурации А, то, согласно оценкам (2), (3), коэффициент ускорения и количество узлов насыщения в случае конфигурации Б должно быть приблизительно в $7^{1/3} \approx 2$ раза больше, чем в случае конфигурации А, что согласуется с приведенными выше результатами расчетов.

4. Автоматизация параллельного расчета независимых сценариев

Как видно из результатов предыдущего параграфа, повышение эффективности за счет использования параллельных вычислений ограничено. Однако при наличии большого количества вычислительных узлов (в составе вычислительного кластера или в сети ГРИД) они могут быть эффективно использованы в случае, когда возникает необходимость пересчета большого количества независимых расчетных сценариев. Такая необходимость возникает, например, при введении новой параметризации в оперативную систему метеопрогноза, когда требуется пересчитать большое количество метеорологических прогнозов за длительный промежуток времени. В задачах моделирования региональных климатических изменений в масштабах ~10–100 лет также целесообразно разбить промежуток моделирования на интервалы длительностью около 1 месяца и рассчитывать их независимо друг от друга.

В связи с этим обстоятельством была создана система параллельного расчета независимых расчетных сценариев с помощью WRF, позволяющая эффективно использовать имеющиеся ресурсы. Система базируется на программе управления выполнением задач

PBS (www.pbs.org) и состоит из следующих основных компонент (рис. 3): PBS, Главная программа Штмп проекта, Данные отдельных прогнозов.

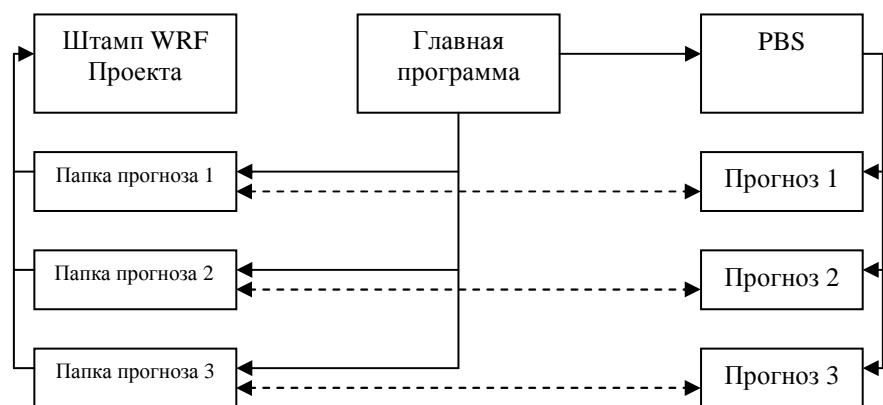


Рис. 3. Схема автоматизированной системы параллельных расчетов независимых сценариев с использованием WRF

Главная программа получает на вход список начальных дат, для которых надо сделать расчеты определенной длительности. Для каждой даты создается отдельная рабочая папка, в которой содержатся ссылки на исполняемые файлы и на неизменные входные данные (например, географические), которые хранятся в отдельной папке (Штмп

проекта). Из той же папки в рабочие папки прогнозов копируются файлы, которые изменяются для разных прогнозов (например, нэймлисты). Создав необходимое количество папок, соответствующих ссылок и копий файлов, главная программа подает на вход PBS задачу на выполнение исполняемого файла из каждой папки прогноза. Работа каждой задачи (прогноза) осуществляется в соответствующей папке.

Для тестирования вычислительной эффективности системы были проведены расчеты метеорологических полей в Закарпатье за период с 1 февраля 2008 г. по 30 сентября 2008 г. (7 месяцев). Расчеты проводились для следующей конфигурации вложенных областей: 22x22, 28x28, 46x46, 91x91 узлов и с соответствующими горизонтальными пространственными шагами 81 км, 27 км, 9 км, 3 км. Расчет за период 7 месяцев разбивался на последовательность расчетов продолжительностью 7 дней. Через каждую неделю расчетов проводилась новая инициализация модели.

Последовательный расчет метеорологических полей для семимесячного периода длился 308 часов, тогда как расчет с помощью описанной выше системы длился 81 ч, следовательно, было достигнуто ускорение почти в 4 раза. При этом, как показал анализ использования узлов кластера во время расчетов (количество задействованных узлов не контролируется пользователем системы, а определяется PBS автоматически, в зависимости от загрузки кластера), в расчетах принимало участие не больше 5 узлов. Таким образом, полученное ускорение практически пропорционально количеству задействованных узлов.

5. Выводы

В работе исследованы возможности применения алгоритмов параллельных вычислений для повышения быстродействия мезомасштабной метеорологической модели WRF. Получены теоретические оценки для алгоритма разбиения вычислений по областям, используемого для повышения быстродействия модели WRF. Согласно этим оценкам, максимальный коэффициент повышения быстродействия и количество процессов, на которых достигается максимальное быстродействие, растет с количеством узлов сетки как $\sim M^{1/3}$ при разбиении вычислительной области перпендикулярными вертикальными сечениями и как $\sim M^{1/4}$ при разбиении области параллельными вертикальными сечениями. Эти оценки согласуются с результатами расчетов WRF: при увеличении количества узлов в 7 раз максимальный коэффициент повышения быстродействия и соответствующее количество процессов возросли в 2 раза. Таким образом, полученные оценки позволяют оценить требуе-

мые вычислительные ресурсы для конкретной задачи, в которой требуется использовать модель WRF.

При наличии большого количества расчетных узлов они могут быть использованы для расчета большого количества независимых расчетных сценариев с помощью автоматизированной системы, представленной в данной работе. В этой системе, с помощью планировщика задач PBS, расчеты распределяются на имеющиеся вычислительные узлы и, как показывают проведенные расчеты, коэффициент производительности таких расчетов практически равен количеству используемых расчетных узлов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была поддержана проектом CRDF, договор № UKG2-2971-KV-09, проектом с Госкоминформнауки, договор № М/122-2010 и Национальной программой внедрения ГРИД-технологий на 2009–2013 гг.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Система численного прогноза погоды WRF-Украина / А.М. Гузий, И.В. Ковалец, А.А. Кушан [и др.] // Математичні машини і системи. – 2008. – № 4. – С. 123 – 131.
2. A description of the advanced research WRF version 3. [Электронный ресурс] / W.C. Skamarock, J.B. Klemp, J. Dudhia [et al.] // NCAR Technical Note NCAR/TN-475+STR. National Center for Atmospheric Research. – Boulder, Colorado, 2008. – 125 p. – Режим доступа: <http://wrf-model.org>.
3. Model based approaches to water resource management in climate change conditions: case studies - Carpathian Watershed and Dnipro River Basin / M. Zheleznyak, I. Kovalets, O. Boyko [et al.] // Proc. of Int. Conf. “Global and Regional Climate Changes”, (Kyiv, Ukraine, 16–19 Nov. 2010). – Kyiv, Ukraine, 2010. – P. 66 – 68.
4. Grid implementation of the weather research and forecasting model / D. Davidovic, K. Skala, D. Belusic [et al.] // Earth Science Informatics. – 2010. – Vol. 3, N 4. – P. 199 – 208.

Стаття надійшла до редакції 26.01.2011