

Разработка параллельного итеративного блока решения уравнения типа Гельмгольца для глобальной модели атмосферы ПЛАВ

Г.С. Гойман

Московский физико-технический институт, ИВМ РАН

Использование в моделях численного прогноза погоды полу неявного метода интегрирования по времени приводит к необходимости решать на каждом шаге уравнение типа Гельмгольца. На данный момент в модели атмосферы ПЛАВ используется прямой метод, основанный на быстром преобразовании Фурье и векторной прогонки. Однако данный метод является неэффективным с вычислительной точки зрения при использовании двумерной декомпозиции области и большого количества ядер. В связи с этим возникает необходимость реализации алгоритма, который может быть эффективно использован на массивно-параллельных системах. В данной работе реализован алгоритм решения двумерных уравнений типа Гельмгольца, основанный на многосеточном методе. Проведены численные тесты, показывающие, что скорость сходимости метода не зависит от размера задачи. Также исследована сильная масштабируемость алгоритма.

Ключевые слова: многосеточный метод, уравнение Гельмгольца, численный прогноз погоды, масштабируемость, MPI

1. Введение

Использование полу неявного метода [1] для интегрирования уравнений динамики в моделях атмосферы является достаточно популярным [2] подходом на сегодняшний день. Основным преимуществом таких методов, по сравнению с явными, является возможность использовать гораздо больший максимальный шаг интегрирования по времени. Однако применение данного подхода приводит к необходимости решать на каждом шаге по времени трехмерное или квазитрехмерное уравнение типа Гельмгольца. Таким образом, эффективность данного подхода во многом зависит от эффективности алгоритма решения системы линейных уравнений, возникающей вследствие дискретизации по пространству. С одной стороны, сходимость такого алгоритма не должна сильно зависеть от размера задачи, иначе при увеличении пространственного разрешения модели потребуется каждый раз пересматривать алгоритм решения. С другой стороны, алгоритм решения должен иметь хорошие параллельные свойства, так как решение задачи численного прогноза на подробном пространственном разрешении требует больших вычислительных мощностей и, как следствие, использования массивно-параллельных систем. Одним из примеров алгоритма, отвечающего таким требованиям, является многосеточный метод. Многосеточные методы являются одним из основных методов решения

В данной работе рассматривается реализация параллельного блока решения квазитрехмерного уравнения типа Гельмгольца на регулярной широтно-долготной сетке с использованием многосеточного метода для дальнейшего внедрения в глобальную модель атмосферы ПЛАВ [3]. Многосеточные методы являются одними из основных методов обращения матриц, возникающих в различных приложениях, а также могут быть использованы как эффективный предобуславливатель для методов Крыловского типа. В работах [5, 10, 11] показано, что такие методы могут быть успешно применены для решения задачи численного прогноза погоды на массивно-параллельных системах.

2. Постановка задачи

В результате дискретизации по времени уравнений динамики в модели ПЛАВ возникает двумерное уравнение типа Гельмгольца на каждом вертикальном уровне:

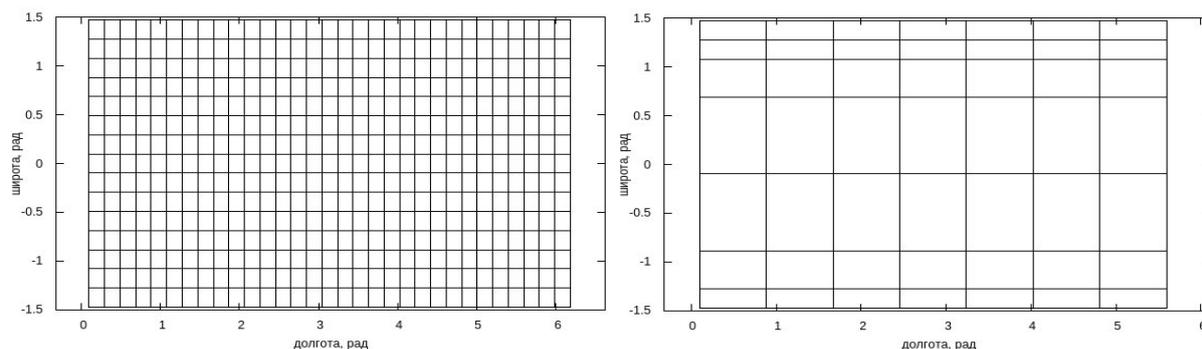
$$(\lambda_k^2 - \Delta)\psi_k = R_k, k = \overline{1, N_z}, \quad (2.1)$$

где λ_k – константа, зависящая от вертикального уровня, ψ_k, R_k – столбец неизвестных и правая часть на k -ом вертикальном уровне, N_z – количество вертикальных уровней в модели. На данный момент для решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающей после дискретизации уравнений (2.1) по пространству, применяется прямой метод с использованием быстрого преобразования Фурье и векторной прогонки [7]. В совокупности с одномерной декомпозицией области по MPI процессам данный алгоритм достаточно эффективен. Однако использование одномерной декомпозиции накладывает ограничение на максимально возможное количество используемых вычислительных ядер, а значит, и на максимально доступную вычислительную мощность. Поэтому, при увеличении пространственного разрешения модели потребуется переход на двумерную декомпозицию области. В тоже время эффективная реализация прямого метода, описанного выше, в совокупности с двумерной декомпозицией является затруднительной. Во-первых, применение быстрого преобразования Фурье потребует глобальных коммуникаций для подсчета частичных сумм. Во-вторых, векторная прогонка является плохо распараллеливаемым алгоритмом. Таким образом, требуется реализовать другой алгоритм решения СЛАУ, который мог бы быть эффективно использован на массивно-параллельных системах.

3. Описание алгоритма

Для пространственной дискретизации уравнений (2.1) на сфере используется стандартная пятиточечная конечно-объемная аппроксимация второго порядка точности [6]. В результате дискретизации на каждом вертикальном уровне возникает СЛАУ с разреженной пятидиагональной матрицей.

В качестве алгоритма решения СЛАУ предлагается использовать многосеточный метод с V-циклом [4]. Данный метод используется в отдельности для каждой двумерной подзадачи. Для сглаживания высокочастотных компонент ошибки используется метод Гаусса-Зейделя с красно-черным упорядочиванием переменных. Операторы продолжения и сгрубления – билинейная интерполяция и сопряжённый к ней оператор 8-ми точечного осреднения. На нижнем уровне цикла матрица обращается с помощью метода бисопряженных стабилизированных градиентов [8]. Одним из главных недостатков стандартного многосеточного метода является ухудшение сходимости при наличии анизотропии в коэффициентах уравнения. В данном случае показатель анизотропии в уравнении выражается как отношение шага сетки по широтному направлению к шагу по долготному направлению, и этот показатель увеличивается по мере приближения к полюсам сетки. В данной реализации используется метод условного сгрубления сетки [5]. Суть данного метода заключается в том, что сетка огрубляется в обоих направлениях только в тех точках, где показатель анизотропии не слишком высок. В этой задаче это приводит к сгрублению сетки только в долготном направлении в околополюсной зоне. При этом количество точек при переходе на более грубую сетку уменьшается приблизительно в три раза, а не в четыре. Построение последовательности грубых сеток производится один раз на стадии инициализации алгоритма. Пример работы



данного алгоритма приведен на рисунке 1.

Рис. 1. Пример работы алгоритма условного сгрубления. Слева сетка размером 32x16 точек, справа эта же сетка после применения двух итераций алгоритма

4. Параллельная реализация

Алгоритм реализован с использованием технологии MPI. Рассмотрим сначала основные идеи параллельной реализации.

Самым простым и логичным вариантом параллельного решения данной задачи было бы использование для каждого вертикального уровня отдельной группы MPI процессов, не взаимодействующих с другими группами. Однако применение такой стратегии в рамках модели ПЛАВ потребовало бы глобальной транспозиции данных между процессами на каждом шаге по времени, что при использовании большого количества процессов может оказаться неэффективным. В данной реализации обмены между MPI процессами для всех вертикальных уровней группируются в один и производятся одновременно, это позволяет не перегружать сеть обменов и уменьшить количество времени, затраченного на их инициализацию. Используется двумерная декомпозиция области по MPI процессам. Обмены с процессами, «лежащими по диагонали» от данного процесса, реализуются при помощи обменов сначала в горизонтальном, а затем в вертикальном направлении [9].

Известно, что параллельная эффективность многосеточных методов падает при движении вниз по циклу, так как уменьшается отношение количества вычислений к количеству обменов. В связи с этим в данной реализации применяется динамическое уменьшение количества MPI процессов по мере уменьшения количества точек, приходящихся на каждый процесс. На последнем уровне V-цикла все данные передаются на один процесс, где происходит обращение матрицы. Данный алгоритм реализован для количества процессов, являющихся степенью двойки, но может быть обобщен и для других делителей.

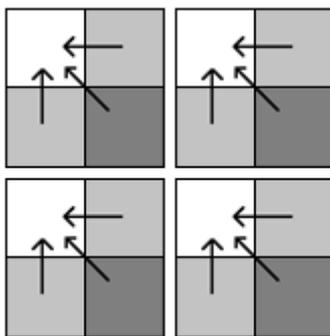


Рис. 2. Схематичное изображение работы алгоритма уменьшения количества MPI процессов.

Рассмотрим в отдельности особенности параллельной реализации некоторых компонент многосеточного метода.

4.1 Оператор сглаживания

Суть метода Гаусса-Зейделя с красно-черным упорядочиванием заключается в последовательном применении итерации метода Якоби сначала к черным, затем к красным точкам. Для параллельной реализации данного метода используется агрегирование обменов – за один обмен передаются данные, необходимые для дальнейшего выполнения всех итераций без осуществления промежуточных обменов. В случае выполнения N итераций данного метода с нулевого начального приближения потребуется обмен правой части глубиной $2*N-1$. В случае итераций, стартующих с ненулевого начального приближения, дополнительно требуется обмен начального приближения глубиной $2*N$. Агрегирование обменов, с одной стороны, позволяет уменьшить расходы на их инициализацию, с другой стороны, эффективнее использовать кэш по сравнению с обменами после каждой частичной операции, так как появляется возможность

выполнить все частичные итерации подряд для каждого уровня, что увеличивает вероятность повторного использования данных, попавших в кэш.

4.2 Оператор сгрубления и вычисление невязки.

После вычисления невязки происходит её перенос на более грубую сетку при помощи оператора сгрубления. Обмены, необходимые для вычисления невязки и её сгрубления, объединяются в один. Это позволяет произвести две операции последовательно для каждого вертикального уровня. Таким образом, количество промахов по кэшу, связанных с использованием невязки, также становится меньше.

5. Численные эксперименты

Сначала исследуем сходимость полученного алгоритма при различном пространственном разрешении и различном количестве итераций оператора сглаживания. В качестве точного решения используется вектор случайных чисел, а правая часть системы получается путем домножения точного решения на матрицу системы. Нас интересует коэффициент сходимости, определяемый по формуле:

$$\mu = \left(\frac{\|\xi_N\|}{\|\xi_1\|} \right)^{\frac{1}{N-1}}, \quad (5.1)$$

где ξ_k – ошибка после k -ой итерации метода, N – количество итераций метода. Важно, чтобы этот коэффициент не зависел от размера задачи.

В таблице 1 приведены коэффициенты сходимости метода при различном пространственном разрешении и количестве итераций оператора сглаживания. Здесь ν_1 – количество итераций оператора сглаживания при движении вниз по циклу, ν_2 – при движении вверх. Сходимость рассматривается для одной двумерной задачи. Из таблицы 1 видно, что сходимость метода практически не зависит от размера задачи.

Таблица 1. Коэффициент сходимости алгоритма при различном разрешении и количестве итераций сглаживания

| | $\nu_1 = 1$ $\nu_2 = 0$ | $\nu_1 = 1$ $\nu_2 = 1$ | $\nu_1 = 2$ $\nu_2 = 1$ | $\nu_1 = 2$ $\nu_2 = 2$ | $\nu_1 = 3$ $\nu_2 = 2$ | $\nu_1 = 3$ $\nu_2 = 3$ |
|-----------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| 128x64 | 0.29 | 0.10 | 0.068 | 0.051 | 0.041 | 0.033 |
| 256x128 | 0.31 | 0.11 | 0.068 | 0.051 | 0.041 | 0.033 |
| 512x256 | 0.32 | 0.12 | 0.069 | 0.052 | 0.042 | 0.035 |
| 1024x512 | 0.33 | 0.13 | 0.069 | 0.052 | 0.041 | 0.034 |
| 2048x1024 | 0.34 | 0.13 | 0.07 | 0.052 | 0.042 | 0.036 |

Перейдем теперь к исследованию масштабируемости реализованного алгоритма. Тесты проводятся на кластере МВС-10П, оснащенном вычислительными узлами с 2 процессорами Intel Xeon E5-2690. Исследуется сильная масштабируемость алгоритма для задачи размером 512x256x28 и 2048x1024x51 точек, это примерно соответствует пространственному разрешению, используемому в двух версиях модели ПЛАВ. Ускорение вычисляется по отношению к времени выполнения на одном вычислительном узле.

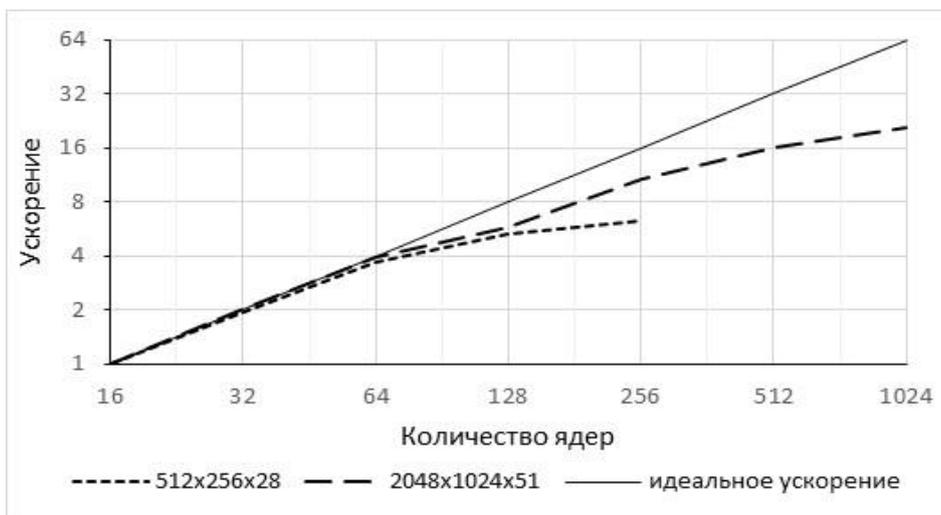


Рис. 3. Сильная масштабируемость алгоритма.

Из рисунка 3 видно, что в задаче с разрешением 512x256x28 ускорение наблюдается вплоть до 256 ядер, в задаче разрешением 2048x1024x51 по крайней мере до 1024 ядер.

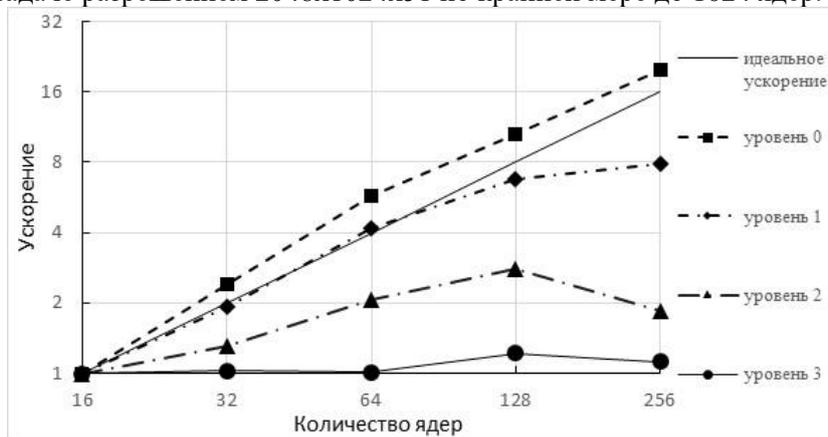


Рис. 4. Масштабируемость первых четырех уровней V-цикла при разрешении 512x256x28

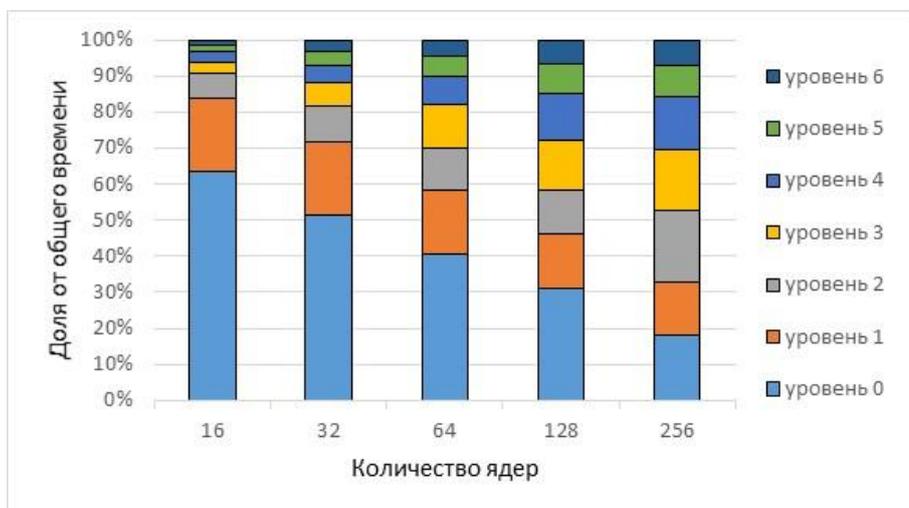


Рис. 5. Доля времени, затраченная на каждом уровне V-цикла при разрешении 512x256x28

Для понимания того, что является ограничивающим фактором масштабируемости алгоритма, рассмотрим масштабируемость на каждом из уровней V-цикла для задачи размером 512x256x28 точек. Из рисунка 4 видно, что на нулевом уровне V-цикла наблюдается сверхлинейное ускорение вплоть до 256 ядер. С другой стороны, уровни выше первого практически не получают ускорения. Вместе с тем, рисунок 5 показывает, что, начиная с 256 ядер, время вычислений на нулевом уровне сравнивается с временем вычислений на остальных уровнях. Таким образом, при использовании большого количества ядер, становится важной параллельная и вычислительная эффективность нижних уровней V-цикла. Основными причинами уменьшения параллельной эффективности в данном случае, по-видимому, является преобладание времени обменов над вычислениями на нижних уровнях V-цикла, наличие дополнительных расходов на уменьшение/увеличение количества MPI-процессов, а также отсутствие равномерного распределения нагрузки между MPI-процессами вследствие применения алгоритма условного сгруппирования.

6. Заключение

В данной работе предложена параллельная реализация многосеточного метода решения квазитрехмерного уравнения типа Гельмгольца, возникающего вследствие применения полуявного метода в глобальной модели атмосферы ПЛАВ. Проведены численные тесты, показывающие независимость сходимости алгоритма от размера задачи, что является очень важным свойством для итеративного метода решения СЛАУ. Также исследована масштабируемость алгоритма для двух различных размеров задачи. В дальнейшем планируется реализация распараллеливания алгоритма на основе гибридной технологии MPI/OpenMP, а также тестирование данного алгоритма в качестве предобуславливателя для метода сопряженных градиентов.

Раздел 4 выполнен за счет гранта № 14-37-00053 Российского научного фонда, раздел 5 при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 33.

Литература

1. André Robert. A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmos. Ocean*, 19(1):35–46, 1981.
2. J Steppeler, R Hess, U Schattler, and L Bonaventura. Review of numerical methods for nonhydrostatic weather prediction models. *Meteorol. Atmos. Phys.*, 82(1-4):287–301, 2003.
3. Толстых М.А Глобальная полулагранжева модель численного прогноза погоды. – М. Обнинск: ОАО ФОП, 2011. – 111 с.
4. Trottenberg U., Oosterlee C. W., Schuller A. *Multigrid*. – Academic press, 2000. 631 p.
5. Buckeridge S., Scheichl R. Parallel geometric multigrid for global weather prediction // *Numerical Linear Algebra with Applications*. – 2010. – Т. 17. – №. 2-3. – С. 325-342.
6. Barros S. R. M. Multigrid methods for two-and three-dimensional Poisson-type equations on the sphere // *Journal of computational physics*. – 1991. – Т. 92. – №. 2. – С. 313-348.
7. Tolstykh M. Vorticity-divergence semi-Lagrangian shallow-water model on the sphere based on compact finite differences // *J. Comput. Phys.*, 2002, v. 179, pp.
8. Van der Vorst H. A. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*. – 1992. Т. 13. – №. 2. – С. 631-644.
9. B. Palmer and J. Nieplocha. Efficient algorithms for ghost cell updates on two classes of MPP architectures. In *Proc. PDCS International Conference on Parallel and Distributed Computing Systems*, pages 192– 197, 2002.

10. Müller E. H., Scheichl R. Massively parallel solvers for elliptic PDEs in numerical weather-and climate prediction, 24 pp. – 2013.
11. Dedner A., Müller E., Scheichl R. Efficient multigrid preconditioners for atmospheric flow simulations at high aspect ratio //International Journal for Numerical Methods in Fluids. – 2016. – T. 80. – №. 1. – С. 76-102.

Development of the parallel iterative Helmholtz problem solver for the SL-AV global atmospheric model

G. S. Goyman

Moscow institute of physics and technology, INM RAS

The use of semi-implicit time stepping in the numerical weather prediction models leads to the Helmholtz type equation, which should be solved at every time step. At the moment, 1d domain decomposition and direct method based on FFT are used in the SL-AV global atmospheric model. However, if 2d domain decomposition and big amount of cores are used, this method will be inefficient. Thus, new solver has to be developed. Parallel multigrid Helmholtz problem solver was implemented. Numerical convergence analysis showed that this method is robust with respect to problem size. Preliminary scalability results are obtained.

Keywords: multigrid method, Helmholtz equation, numerical weather prediction, MPI, scalability

References

1. André Robert. A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmos. Ocean*, 19(1):35–46, 1981.
2. J Steppeler, R Hess, U Schattler, and L Bonaventura. Review of numerical methods for nonhydrostatic weather prediction models. *Meteorol. Atmos. Phys.*, 82(1-4):287–301, 2003.
3. Tolstykh M. A. *Global'naya populagranzheva model' chislennogo prognoza pogody.* – M. Obninsk: OAO FOP, 2011. – 111 P.
4. Trottenberg U., Oosterlee C. W., Schuller A. *Multigrid.* – Academic press, 2000. 631 p.
5. Buckeridge S., Scheichl R. Parallel geometric multigrid for global weather prediction // *Numerical Linear Algebra with Applications.* – 2010. – T. 17. – №. 2-3. – C. 325-342.
6. Barros S. R. M. Multigrid methods for two-and three-dimensional Poisson-type equations on the sphere // *Journal of computational physics.* – 1991. – T. 92. – №. 2. – C. 313-348.
7. Tolstykh M. Vorticity-divergence semi-Lagrangian shallow- water model on the sphere based on compact finite differences // *J. Comput. Phys.*, 2002, v. 179, pp.
8. Van der Vorst H. A. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing.* – 1992. T. 13. – №. 2. – C. 631-644.
9. B. Palmer and J. Nieplocha. Efficient algorithms for ghost cell updates on two classes of MPP architectures. In *Proc. PDCS International Conference on Parallel and Distributed Computing Systems*, pages 192– 197, 2002.
10. Müller E. H., Scheichl R. Massively parallel solvers for elliptic PDEs in numerical weather-and climate prediction, 24 pp. – 2013.
11. Dedner A., Müller E., Scheichl R. Efficient multigrid preconditioners for atmospheric flow simulations at high aspect ratio // *International Journal for Numerical Methods in Fluids.* – 2016. – T. 80. – №. 1. – C. 76-102.