

На правах рукописи

Калмыков Владимир Владимирович

**Программный комплекс численного моделирования
совместной системы океан-атмосфера на
массивно-параллельных компьютерах**

05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова.

- Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН,
Ибраев Рашит Ахметзиевич
- Официальные оппоненты: **Катцов Владимир Михайлович**,
доктор физико-математических наук,
профессор,
директор Федерального государственного
бюджетного учреждения Главной геофизической
обсерватории им.А.И.Воейкова
- Коньшин Игорь Николаевич**,
кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник Федерального государственного
бюджетного учреждения Вычислительного центра
им. А.А. Дородницына Российской академии наук
- Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт вычислительной
математики и математической геофизики
Сибирского отделения Российской академии наук

Защита состоится 23 декабря 2013 г. в 15⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики Российской академии наук (ИВМ РАН) по адресу: 119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИВМ РАН.

Автореферат разослан ноября 2013 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 002.045.01,
доктор физико-математических наук

Г.А. Бочаров

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Как отмечалось на Всемирной конференции по моделированию и прогнозированию климата (WCRP, 2008), существует согласие о том, что гораздо более высокое, по сравнению с существующим, разрешение моделей основных компонентов (атмосфера, океан, лед, суша) является главной предпосылкой для реалистичного представления климатической системы. Сложность физических и химико-биологических процессов в Земной системе и большой объем данных о состоянии системы ставят задачу моделирования изменений климата Земли в ряд самых вычислительно емких в науке. Объединенный ансамбль физических моделей, реализованный на параллельных компьютерах, задействует огромные вычислительные ресурсы. Согласно сделанным предварительным оценкам, реализация перспективной модели Земной системы, предназначенной для моделирования климата, может потребовать миллионов процессорных ядер.

Последние исследования подтверждают преимущества моделей высокого разрешения (Gent et al., 2009; Wehner et al., 2010; McClean et al., 2011; Bryan et al., 2010). Современное понятие *высокое разрешение* предполагает горизонтальный шаг сетки 0.1° для модели Мирового океана и 0.25° для модели глобальной атмосферы (в работе (Dennis et al., 2012) подобное разрешение также называется «ultra high-resolution»). В настоящей работе под высоким пространственным разрешением мы будем понимать горизонтальный шаг сетки модели около 0.1° и менее. Несмотря на то, что подобного пространственного разрешения пока достигли только несколько исследовательских центров, в работе мы будем ориентироваться именно на него, как на наиболее перспективное.

Первые совместные модели представляли собой прямое объединение моделей отдельных компонентов Земной системы и не требовали разработки дополнительных алгоритмов. По мере повышения сложности моделей, роста их разрешения и соответствующих вычислительных мощностей встала задача построения отдельных программных комплексов, в рамках которых могут совместно работать несколько компонентов Земной системы, причем связью моделей в единую систему занимается новый сервисный компонент – *каплер* (от англ. coupler). Разработка каплера, численных алгоритмов для него и архитектуры программного комплекса для совместного моделирования является отдельной задачей, не связанной с разработкой физических моделей. К главным задачам комплекса относятся синхронизация работы моделей, численные алгоритмы интерполяции данных между различными сетками компонентов, параллельные алгоритмы работы с файловой системой. Таким образом, современная совместная модель состоит из нескольких физических моделей и дополнительного внешнего программного обеспечения, разработка которого является чрезвычайно актуальной задачей.

Основными целями диссертационной работы являются: разработка архитектуры Программного комплекса для совместного моделирования (ПКСМ) системы Мировой океан-глобальная атмосфера, расширяемой на произвольное число моделей; разработка

эффективного параллельного вычислительного алгоритма интерполяции между сетками произвольных пар компонентов системы; разработка эффективного параллельного алгоритма работы с файловой системой на массивно-параллельных компьютерах с распределенной памятью; усовершенствование вычислительных алгоритмов модели Мирового океана ИВМ-ИО для создания масштабируемой версии высокого пространственного разрешения; тестирование ПКСМ в рамках модели Мирового океана высокого разрешения ИВМ-ИО и в рамках совместной модели Мирового океана ИВМ-ИО и глобальной атмосферы ПЛАВ для сезонных прогнозов погоды.

Научная новизна. Предложена абстрактная архитектура комплекса, расширяющая наиболее современную архитектуру с управляющим драйвером. Предложена и реализована параллельная версия вычислительного алгоритма многоуровневой интерполяции для произвольных пар геофизических моделей на логически-прямоугольных сетках. Алгоритм показал лучшую производительность, по сравнению с реализованным в наиболее современных кластерах (CESM cpl7, MCT, OASIS). Для ПКСМ разработана параллельная асинхронная система ввода-вывода, позволяющая совмещать вычисления и работу с файловой системой. Данная схема не реализована сегодня ни в одной из систем совместного моделирования. Представленный в работе программный комплекс является первым в России параллельным комплексом для совместного моделирования, предназначенным для объединения моделей высокого пространственного разрешения на массивно-параллельных компьютерах. С применением ПКСМ реализована математическая модель гидродинамики Мирового океана с разрешением 0.1° и разработана совместная модель Мирового океана ИВМ-ИО и глобальной атмосферы ПЛАВ с разрешением 0.225° в атмосфере и 0.25° в океане, ориентированная на использование в среднесрочном и долгосрочном прогнозе. Такое разрешение в совместной модели достигнуто впервые в России.

Научная и практическая значимость. Разработанный программный комплекс позволяет создавать комплексные модели Земной системы высокого разрешения на высокопроизводительных компьютерах. Эффективность параллельной реализации ПКСМ подтверждена тестами на современных машинах («Ломоносов», «BlueGene/Q», «MBC-10p» и др.). Разработанная параллельная версия вычислительного алгоритма с перекрытиями для решения уравнений мелкой воды модели Мирового океана позволила устранить «узкое место» параллельной версии. Под управлением ПКСМ работают математическая модель гидродинамики Мирового океана и совместная модель Мирового океана ИВМ-ИО и глобальной атмосферы ПЛАВ.

Достоверность результатов диссертационной работы обоснована использованием в работе теории численных методов и строгих математических выводов, а также результатами вычислительных экспериментов и сравнением их с данными наблюдений.

Личный вклад автора. Представленная диссертация является самостоятельным законченным трудом автора. Научные результаты диссертации, выносимые на защиту, получены лично автором, являются новыми. Результаты других авторов, упомянутые в тексте

диссертации, а также полученные в соавторстве, отмечены соответствующими ссылками.

Публикации по теме диссертации. Было опубликовано 12 работ: 2 статьи в журналах из списка ВАК и свидетельство о государственной регистрации, 1 учебное пособие, 3 в различных сборниках, 5 в качестве тезисов конференций.

Апробация работы. Результаты настоящей работы докладывались на следующих конференциях, семинарах и научных школах: «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопное будущее», Абрау-Дюрсо, 2011 (рекомендована к публикации); «Ломоносовские чтения», Москва, 2012; «Тихоновские чтения», Москва, 2012; «CSC High-Performance Computing», Эспо, Финляндия, 2012; «Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма», Абрау-Дюрсо, 2013 (рекомендована к публикации); «VII Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям», Томск, 2013.

Работа была поддержана стипендией Президента РФ для аспирантов № 136 (28/02/2013), а также частично грантами РФФИ (12-05-01155-а, 13-05-01141-а, 12-05-31317_мол_а), проектом фундаментальных исследований Президиума РАН №16, №23, грантами Министерства образования и науки в рамках ФЦП «Кадры».

Структура и объем. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка литературы из 95 наименований. Работа содержит 56 рисунков.

Основное содержание работы

Во **Введении** раскрывается актуальность научной темы, приводится исторический обзор систем для создания совместных моделей, формулируются цели и задачи работы, представлена научная новизна и практическое значение работы, сообщается о публикациях и докладах по теме диссертации.

В **Первой главе** приводится краткое описание математических моделей Мирового океана и глобальной атмосферы, используемых как основа для создания совместной модели Земной системы высокого разрешения. Модель Мирового океана разработана в Институте вычислительной математики РАН и в Институте океанологии им.П.П. Ширшова РАН, далее модель ИВМ-ИО. Основные характеристики модели, уравнения и краевые условия, а также конечно-объемная аппроксимация уравнений модели представлены в работах (Ибраев и др., 2001; Ибраев, 2008). Реализация модели Мирового океана ИВМ-ИО с разрешением 0.1° по горизонтали и 49 вертикальными уровнями и результаты численных исследований, выполненных с ее помощью, представлены в работах (Ибраев, Калмыков и др. 2011; Ибраев и др., 2012; Толстых, Ибраев и др., 2013). Глобальная полулагранжева модель атмосферы ПЛАВ (ПолуЛагранжева, основанная на уравнении Абсолютной завихренности) разработана в Институте вычислительной математики РАН и Гидрометцентре России с помощью консорциума ALADIN/LACE, предоставившего параметризацию процессов подсеточного масштаба. Детально математическая модель глобальной атмосферы рассмотрена в работах (Толстых, 2002; Толстых, 2003; Толстых, 2010).

Состояние термогидродинамики океана описывается трехмерными нестационарными функциями температуры, солёности, компонент скорости течений, а также двумерной функцией высоты поверхности океана. Модель термогидродинамики океана включает в себя трехмерные полные уравнения геофизической термогидродинамики (Саркисян, 1966; Саркисян, 1977; Саркисян, 1981; Марчук, 1988). Уравнения математической модели формулируются в декартовой системе координат (x, y, z) . При этом поверхность $z = 0$, соответствующая невозмущенной поверхности океана, совпадает с геопотенциальной поверхностью. Задача решается в трехмерной области Ω . Границей области является поверхность $G = G_H \cup G_\zeta \cup G_S$, где G_H – нижняя граница, задаваемая двумерной положительной функцией $z = H(x, y)$, описывающей топографию дна океана, $0 < H_{min} \leq H(x, y) \leq H_{max}$; G_S – боковая твердая граница. Верхняя граница области G_ζ подвижная и описывается уравнением $z = -\zeta(x, y, t)$, где $\zeta(x, y, t)$ – отклонение поверхности океана от невозмущенного уровня $z = 0$. В системе уравнений используются приближения несжимаемости, Буссинеска и гидростатики. Система уравнений:

$$u_t + (\mathbf{v} \cdot \vec{\nabla})u - fv = -\rho_0^{-1}p_x + (K_m u_z)_z + D^u \quad (1)$$

$$v_t + (\mathbf{v} \cdot \vec{\nabla})v + fu = -\rho_0^{-1}p_y + (K_m v_z)_z + D^v \quad (2)$$

$$p_z = \rho g \quad (3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4)$$

$$T_t + (\mathbf{v} \cdot \vec{\nabla})T = (K_h T_z)_z + D^T + (c_p \rho)^{-1} Q^H \quad (5)$$

$$S_t + (\mathbf{v} \cdot \vec{\nabla})S = (K_h S_z)_z + D^S \quad (6)$$

$$\rho = \rho(T, S, p) \quad (7)$$

Динамика верхней границы океана с учетом потока массы (осадков, испарения, таяния льда) описывается уравнением свободной поверхности океана (Каменкович, 1973):

$$\zeta_t + u\zeta_x + v\zeta_y + w = \rho_f^{-1}W$$

В уравнениях приняты следующие обозначения: $\mathbf{v} = (u, v, w)$ – вектор скорости течений; T, S – температура и солёность морской воды; ρ, ρ_0 – плотность и средняя по области плотность морской воды; ρ_f – плотность пресной воды; f – параметр Кориолиса; K_m, K_h – коэффициенты вертикальной турбулентной вязкости и диффузии; D^u, D^v, D^T, D^S – члены, описывающие горизонтальную турбулентную вязкость и диффузию тепла и соли; Q^H – источник тепла; c_p – теплоемкость морской воды; W – поток воды на границе атмосфера-океан, равный $P + M - E$, где P – интенсивность осадков; E – интенсивность испарения; M – интенсивность таяния льда.

Граничные условия потоков тепла, влажности и импульса на границе атмосфера-океан

с явным учетом потока воды (Ибраев, 2008) ставятся на поверхности океана $z = -\zeta(x, y, t)$:

$$-K_m(u_z, v_z) + (u, v) \cdot \rho_f^{-1} W = \rho_0^{-1} (1 - A) (\tau^x, \tau^y)$$

$$p = p_a$$

$$-c_p K_h T_z + c_p T \rho_f^{-1} W = \rho_0^{-1} [Q_h^{aw} (1 - A) + Q_h^{iw} A]$$

$$-K_h S_z + S \rho_f^{-1} W = \rho_0^{-1} S^{iw} M A$$

Здесь $\tau^x(x, y, t)$, $\tau^y(x, y, t)$ – касательное напряжение трения ветра; $Q_h^{aw}(x, y, t)$ – поток тепла на границе воздух - вода; $Q_h^{iw}(x, y, t)$ – поток тепла на границе лед-вода; S^{iw} – соленность льда; $S^{iw} M$ – интенсивность выделения соли в океан при таянии льда. Граничные условия для остальных границ расчетной области имеют стандартный вид и подробно описаны в (Ибраев, 2008).

При численной реализации модели уравнения переформулируются для произвольной в горизонтальной плоскости криволинейной ортогональной системы координат (x_1, x_2, z) . Это позволяет в зависимости от размеров моделируемого бассейна решать уравнения в декартовой или сферической системе координат. Для Мирового океана уравнения решаются в трехполюсной системе координат (Murray, 1996).

Решение динамической подсистемы уравнений разбивается на две части – решение трехмерных уравнений для бароклинных движений и решение двумерных уравнений мелкой воды для баротропных движений. При неявной аппроксимации по времени система уравнений для баротропных движений сводится к эллиптическому уравнению для уровня океана (Ибраев, 2001). В модели МО ИВМ-ИО применена явная аппроксимация по времени для решения системы уравнений мелкой воды, рассмотренная в работе (Killworth et al., 1991). Для быстрого решения системы уравнений мелкой воды на массивно-параллельных компьютерах применен алгоритм с перекрытиями (Калмыков, Ибраев, 2013), рассмотренный в главе 2.

В **разделе 1.3** формулируются физические условия, необходимые для работы совместной системы океана и атмосферы. Из приведенных выше уравнений следует, что от модели атмосферы океану необходимы компоненты напряжения трения ветра, потоки коротковолновой и длинноволновой радиации, потоки явного и скрытого тепла, осадки, испарение, атмосферное давление. В модели атмосферы необходимо знать такие характеристики поверхностного слоя океана, как температуру поверхности океана, сплочённость и температуру поверхности льда. В более детальной постановке, для расчета потока импульса, необходимо знать скорость поверхностных течений.

Основной целью работы является разработка совместной модели для компонентов высокого пространственного разрешения. Базовые горизонтальные разрешения сеток для используемых в совместном эксперименте моделей составляют 3600×1800 точек для компонентов Мирового океана ИВМ-ИО (льда), 1600×864 точек для компонентов глобальной

атмосферы (почвы). Таким образом, для удовлетворения физической постановке задачи, необходимо примерно каждый модельный час (около 10-20 итераций цикла, в зависимости от временного шага компонента) передавать 12 полей. В итоге, через объединяющее модели программное обеспечение только для двух компонентов океана и атмосферы будет проходить примерно: $(3600 \cdot 1800)(3+9) + (1600 \cdot 864)(3+9) \approx O(10^8)$ ячеек. Указанные данные не могут быть напрямую переданы от компонента-источника компоненту-получателю, поскольку имеют, вообще говоря, различные сетки. Поэтому, помимо MPI-пересылки, поля должны быть переинтерполированы на новую сетку. Очевидно, такая задача может быть решена только с помощью распределенных вычислений. Поскольку число моделей, их разрешения, параллельные конфигурации и количество обмениваемых функций могут быть различными, то возникает требование поддержки произвольного числа связей «компонент-компонент».

В **разделе 1.4** формулируются основные проблемы, связанные с созданием совместной модели Земной системы. Разрабатываемая система совместного моделирования должна учитывать высокое пространственное разрешение сеток компонентов Земной системы и их произвольность, из чего следует: 1) локальность коммуникаций, 2) параллельность алгоритма интерполяции и 3) абстрактный вид системы для поддержки различных комбинаций моделей на различных сетках. Кроме того, система должна 4) уметь объединять распределенный код моделей в единый исполняемый файл для запуска на суперкомпьютере, 5) реализовывать эффективный параллельный алгоритм работы с файловой системой и 6) производить поддержку всего цикла жизни модели (довычислительная и поствычислительные стадии).

Во **Второй главе** приводится описание двух вычислительных алгоритмов, являющихся ключевыми для производительности каплера ПКСМ и математической модели Мирового океана ИВМ-ИО.

Физические требования и абстрактная архитектура ПКСМ требуют разработки эффективного многоуровневого параллельного алгоритма интерполяции для произвольных пар логически-прямоугольных сеток. Данный алгоритм, являющийся ядром каплера ПКСМ, описан в первой части этой главы. Задача интерполяции данных между сетками является основной и решается тем или иным образом для каждой совместной системы. Очевидным решением является разделение ее на два этапа: подготовительный и вычислительный.

Поскольку подготовительный этап не зависит от архитектуры системы совместного моделирования, его работа может быть стандартизована. Поэтому сегодня во всех разрабатываемых в мире системах совместного моделирования для построения матрицы интерполяционных весов используется пакет SCRIP (Jones, 1998). Такие известные системы как CCSM/CESM, OASIS3, OASIS-MCT, ESMF и т.д. предполагают наличие матрицы в SCRIP-формате для объединения моделей на этапе счета. Представленная в работе система ПКСМ следует этому соглашению.

Пакет предоставляет возможность строить матрицы весов для билинейного, бикубиче-

ского, консервативного, ближайшего соседа и др. методов. Наиболее распространенными в современных моделях являются методы билинейной (для обмена переменными состояниями) и консервативной (для обмена потоками) интерполяции. Например, для того, чтобы посчитать поток \bar{F}_k на сетке получателя с сохранением интеграла первоначального потока f на сетке источника, очевидно, для каждой точки сетки получателя k должно выполняться:

$$\bar{F}_k = \frac{1}{A_k} \iint_{A_k} f dA = \sum_{n=1}^N \frac{1}{A_k} \iint_{A_{nk}} f_n dA, \quad (8)$$

где \bar{F}_k представляет собой осредненный поток; A_k – площадь ячейки k ; A_{nk} – часть ячейки n источника, покрытая ячейкой получателя k ; f_n – локальное значение потока ячейки источника n .

Билинейный метод также описан во многих источниках. Работа пакета SCRIP заключается в обходе четырех соседей ячейки получателя и вычислении весов из соображений ее положения относительно них.

В итоге, если W – построенная на довычислительном этапе матрица весов, то интерполяция, например, с сетки атмосферы на сетку океана во время счета выглядит как умножение матрицы на вектор:

$$\begin{pmatrix} o_1 & o_2 & \cdots & o_m \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \cdots & w_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}^T \quad (9)$$

Здесь двумерные поля компонентов вытянуты в векторы с глобальной нумерацией, и n соответствует числу ячеек сетки модели атмосферы (например, 1600×864), m – модели океана (например, 3600×1800). В приведенном примере матрица весов содержит примерно 9×10^{12} элементов, но W – разреженная, большинство ее элементов нулевые, и она хранится в индексированном виде, используемом в SCRIP-формате, то есть в виде трех массивов: wts_{ij} (веса), src_{ij} (адрес ячейки сетки источника), dst_{ij} (адрес ячейки сетки получателя).

Задача вычислительного этапа – собрать данные с источника, умножить их на разреженную матрицу W и распределить данные получателю для каждой пары «компонент-компонент». К сожалению, такой простой вид алгоритма (прямое умножение матрицы на вектор по формуле (9)) становится неприменимым на практике при росте размеров сеток моделей. Дело в том, что формула (9) подразумевает наличие в памяти процессора всех элементов вектора сетки источника. Очевидно, что использование в алгоритме сеток высокого разрешения сделает подобные глобальные вычисления попросту невозможными из-за нехватки памяти вычислительного ядра. Поэтому необходимо расширить алгоритм для применения его в реальных вычислениях, где он будет вызван десятки тысяч раз за

один эксперимент.

Пусть компонент i (*источник*) на сетке S_i отправляет данные компоненту j (*получатель*) на сетке D_j . Пусть S_{ip} – множество точек, принадлежащих p -му ядру каплера ($p = \overline{1, P}$) после декомпозиции им области источника i , D_{jp} – множество точек, принадлежащих p -му ядру каплера после декомпозиции им области получателя j . При этом нам необходимо получить результат R_{jp} в этих точках, основываясь на входных данных I_{ip} , определенных в точках источника S_{ip} . Введем также отношение $s \rightarrow d$, означающее, что для вычисления точки получателя d используется точка источника s . Данные связи могут быть установлены при анализе входных массивов $src_{ij}, dst_{ij}: s \rightarrow d, s \in S, d \in D \sim \exists n : src_{ij}(n) = s \in S, dst_{ij}(n) = d \in D$. Обозначим также через $N(S, d)$ множество всех связей, ведущих из множества точек источника S в точку получателя $d \in D$: $N(S, d) = \{n : s \rightarrow d, s \in S\}$.

Чтобы прояснить проблему параллельного алгоритма, рассмотрим сначала простейший случай, когда два компонента (источник и получатель) выполняются на одном ядре и интерполяцию выполняет также одноядерный каплер (Рис. 1а). Здесь каплер сразу имеет доступ к любой ячейке источника и поэтому сразу может реализовать (9) в виде умножения разреженной матрицы на вектор:

$$R_{j1}(d) = \sum_{n \in N(S_{i1}, d)} wts_{ij}(n) I_{i1}(src_{ij}(n)), \quad d \in D_{j1} \quad (10)$$

В случае, если компоненты становятся параллельными ($M, N > 1$), а каплер остается последовательным ($P = 1$), данный алгоритм по-прежнему реализует глобальную формулу (10), но уже после сбора каплером входных данных I_{i1} с параллельной декомпозиции модели-источника (Рис. 1б). Такой алгоритм используется, например, в системе OASIS3 (Valcke, 2013).

Интересующий нас случай представляет собой комбинацию параллельных моделей ($M, N > 1$) и параллельного каплера ($P > 1$) (Рис. 1в). Из рисунка видно, что для вычисления суммы с весами в точке получателя необходимо получить данные от трех ядер каплера, отмеченных разными цветами. Таким образом, в параллельном случае возникает задача динамического (различного для каждой новой пар M, N) восстановления связей между компонентами, и эта задача должна быть выполнена параллельно на P ядрах каплера. Стоит отметить, что описанные связи различаются для каждой пары компонент-компонент, то есть от алгоритма требуется корректная поддержка произвольного числа межмодельных взаимодействий (например, океан-атмосфера, атмосфера-океан, лед-океан, лед-атмосфера) с разрешением всех внутренних связей.

Чтобы распределенно переинтерполировать глобальное поле S_i на поле D_j , нам необходимо на каждом ядре каплера p заполнить результатами точки D_{jp} . Объединение этих локальных для каждого ядра каплера полей как раз дает всю искомую область: $D_j = \bigcup_{p=1}^P D_{jp}$.

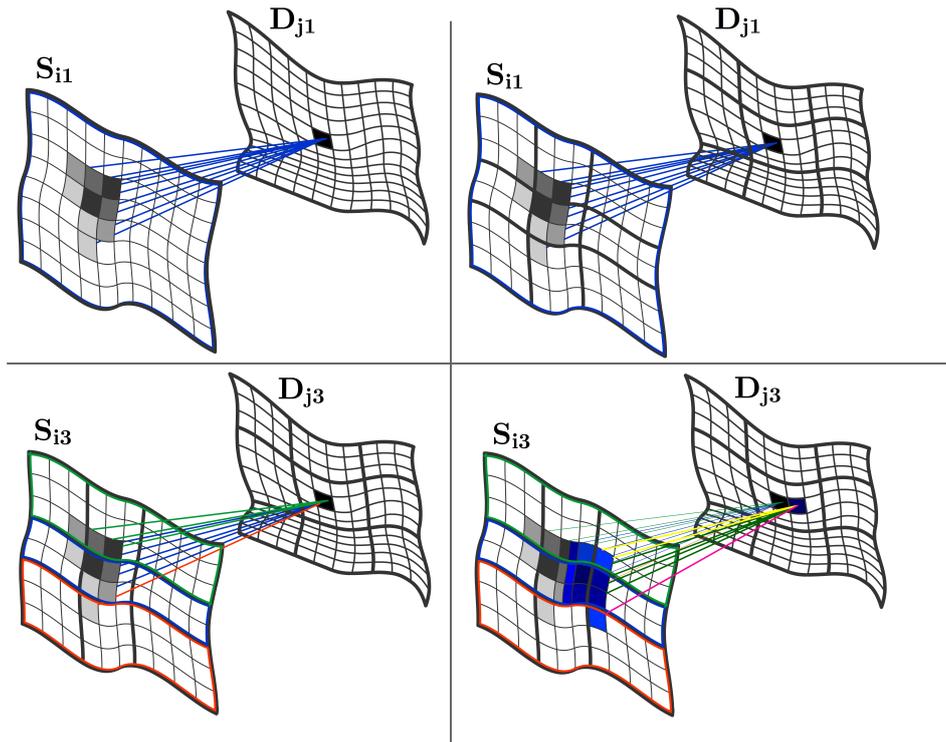


Рис. 1. Схемы интерполяции: а) для последовательной конфигурации $\text{src}(M=1)\text{-cpl}(P=1)\text{-dst}(N=1)$; б) для последовательной конфигурации $\text{src}(M>1)\text{-cpl}(P=1)\text{-dst}(N>1)$; в) для параллельной конфигурации $\text{src}(M>1)\text{-cpl}(P>1)\text{-dst}(N>1)$; г) ситуация дублирования данных, возникающая в схеме параллельной интерполяции при реализации пересекающихся связей.

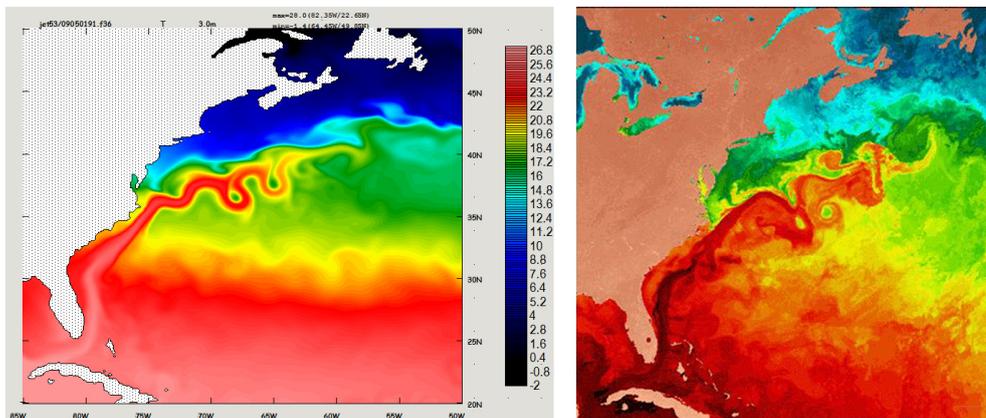


Рис. 2. Температура поверхности океана в районе течения Гольфстрим через 9 лет интегрирования модели, соответствующая 1 мая по данным модели Мирового океана $1/10^\circ \times 1/10^\circ \times 49$ (слева) и по данным со спутника (Национальное управление океанических и атмосферных исследований, сайт seacoos.org) (справа)

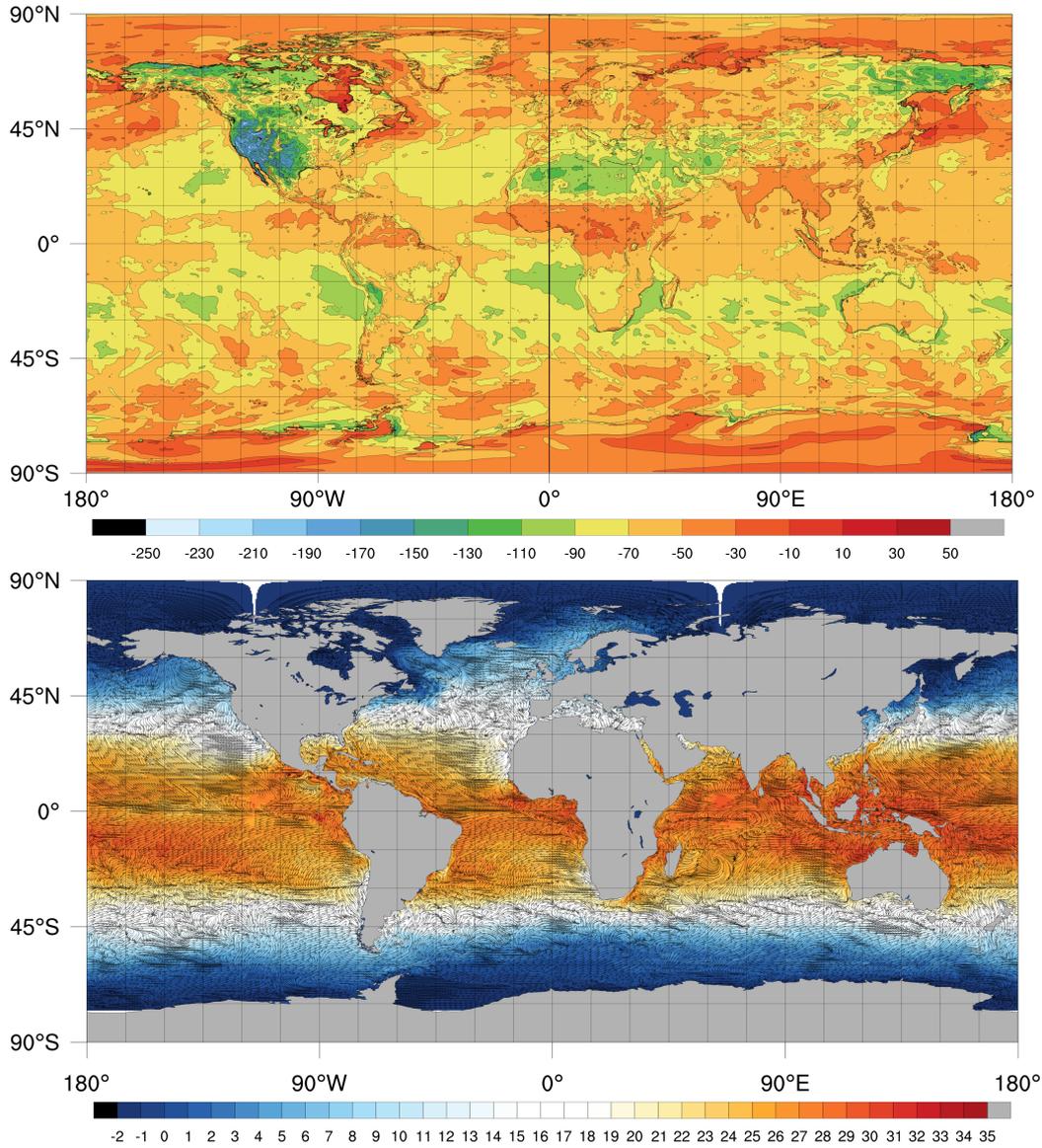


Рис. 3. Поверхностный поток длинноволновой радиации ($\text{Вт}/\text{м}^2$) на момент полудня по Гринвичу – среднемесячное поле для летнего прогноза модели (сверху) и температура ($^{\circ}\text{C}$, цветовая шкала) и скорость течения (м/с, стрелки) в океане на глубине 3 м – среднемесячное поле для зимнего прогноза модели (снизу).

Модифицируем формулу последовательной интерполяции (10) для случая $P > 1$. В параллельном случае каждое ядро каплера p имеет доступ только к локальной части области источника и получателя (S_{ip} и D_{jp}), поэтому формула для каждого ядра $p = \overline{1, P}$ теперь имеет вид:

$$R_{jp}(d) = \sum_{c=1}^P \sum_{n \in N(S_{ic}, d)} wts_{ij}(n) I_{ic}(src_{ij}(n)), \quad d \in D_{jp} \quad (11)$$

Индекс c подчеркивает необходимость наличия информации от ядер-соседей c данного ядра p . При этом, очевидно, только локальная часть вычислений, отвечающая случаю

$c = p$, может быть получена по формуле напрямую. Для остальных $c \neq p$ требуются межпроцессорные MPI-обмены. Так возникает схема интерполяции *на стороне источника* (**раздел 2.1.3**), то есть схема: «получи значения, а потом посчитай общую сумму». Поэтому сначала каждый процесс p строит свои запросы Q_{ijpc} для всех остальных ядер каплера (c), то есть оповещает соседей, какие ячейки должны быть присланы ему. Такие запросы формируются для каждой точки получателя $d \in D_{jp}$. Очевидно, что Q_{ijpc} может содержать повторяющиеся ячейки, так как точка источника может быть использована при умножении на веса несколько раз, например, k соседними точками получателя: $\exists d_1, d_2, \dots, d_k : s \rightarrow d_1, s \rightarrow d_2, \dots, s \rightarrow d_k$.

При этом возникает ситуация отправки дублированных данных (Рис. 1г), так как запрос для некоторого ядра c предполагает наличие k копий ячейки s . Поэтому, для повышения эффективности процедуры (обрабатывающей за цикл $O(10^8)$ ячеек) запросы должны отслеживать и исключать повторные вхождения данных.

Во время основной фазы каждое ядро каплера p сначала заполняет буферы отправки уникальными данными Iu_{ijpc} в ячейках Qu_{ijpc}^* компонента-источника и производит старт отложенной MPI-операции отправки, то есть отправляет всю необходимую информацию соседям c . Далее, пока выполняется асинхронная отправка данных, происходит вычисление взвешенной суммы для локальных ячеек ядра каплера $c = p$, то есть реализуется перекрытие вычислений и обменов. Наконец, инициализируется прием отложенного запроса от каждого соседа $c \neq p$, и оставшиеся данные добавляются в посчитанные суммы с использованием присланных уникальных ячеек Iu_{ijpc} и декодирующего их массива $C_{ijpc}(n)$ (нужного для восстановления информации о глобальном адресе ячейки из уникального запроса):

$$R_{jp}(d) = \sum_{n \in N(S_{ip}, d)} wts_{ij}(n) I_{ip}(src_{ij}(n)) + \sum_{\substack{c=1 \\ c \neq p}}^P \sum_{n \in N(S_{ic}, d)} wts_{ij}(n) Iu_{ijpc}(C_{ijpc}(n)), \quad d \in D_{jp} \quad (12)$$

Другой путь получить переинтерполированные данные в области D_{jp} состоит в вычислении частичных сумм на локальной области каждого ядра каплера c с последующим обменом (уже не ячейками, а суммами) и сложением их в окончательный результат. Так возникает схема интерполяции *на стороне получателя* (**раздел 2.1.4**), то есть схема: «посчитай частичные суммы, а потом обменяйся ими».

Алгоритм гарантирует совпадение результатов с исходной теоретической схемой (9) и, соответственно, наследует характеристики точности интерполяции используемой схемы, которая определяется на подготовительном этапе. Приведенные выше модификации являются необходимым условием для работы алгоритма на реальных вычислителях. Алгоритм линейно масштабируется на нескольких суперкомпьютерах («MBC-100k», «MBC-10p» (Рис. 4), «Ломоносов», «BlueGene/P», «BlueGene/Q»). Получена лучшая, по сравнению с каплером CESSM cpl7 (Craig et al., 2012), скорость работы блока, что подтверждает

ет важность тонкой оптимизации ключевых алгоритмов (отложенность MPI-операций, буферизованность данных, перекрытие вычислений и обменов) для результатов работы всей системы. Также были проведены тесты для анализа влияния увеличения коммуникационной нагрузки, связанные с ростом коммутаторов компонентов. Максимальная конфигурация на компьютере «BlueGene/Q» составляла: океан (17280 ядер)-каплер (864 ядра)-атмосфера (13824 ядра). Даже на таких размерах компонентов была получена окололинейная скорость, что позволяет говорить о хорошей локализации данных, обменов и общей архитектуры коммуникационной сети каплера. Третий тест для перспективного разрешения сетки модели Мирового океана (7200×3600) и атмосферы ПЛАВ (1600×864) подтвердил устойчивую работу алгоритма для огромных массивов данных.

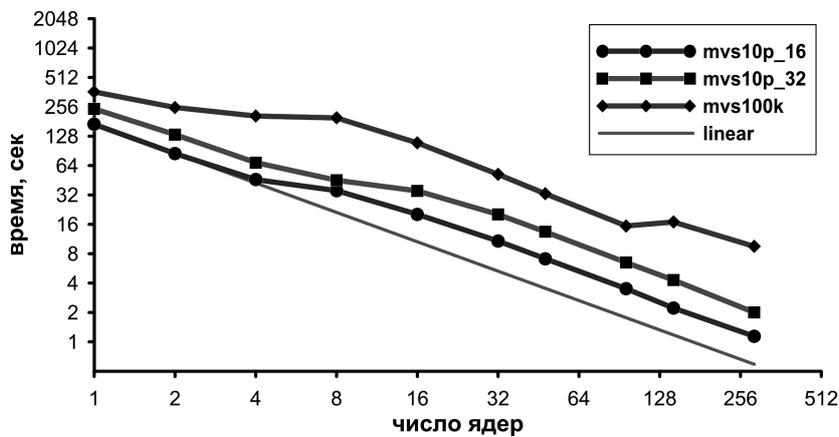


Рис. 4. Время работы процедуры интерполяции в секундах в зависимости от размера коммутатора каплера на суперкомпьютерах семейства «МВС»: «МВС-100к», «МВС-10р» с 16 ядрами на узел, «МВС-10р» с 32 ядрами на узел.

Применение метода декомпозиции области для модели Мирового океана и следующая из него явная схема по времени делают небольшой блок решения двумерной системы уравнений мелкой воды серьезнейшим «узким местом» модели. Развитие модели Мирового океана требует применения эффективного алгоритма решения уравнений мелкой воды. Данная проблема описана во второй части главы. Система уравнений мелкой воды выводится из трехмерной системы уравнений крупномасштабной динамики океана путем интегрирования уравнений по вертикали:

$$\begin{cases} U_t - fV = -gH \frac{\partial \eta}{\partial x} + R^U \\ V_t + fU = -gH \frac{\partial \eta}{\partial y} + R^V \\ \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = R^n \end{cases} \quad (13)$$

Здесь U, V – проинтегрированные по вертикали (баротропные) потоки, η – уровень океана, f – параметр Кориолиса, g – ускорение свободного падения, H – глубина океана, R^U, R^V, R^n – члены источника. Для решения системы (13) применим явную схему аппроксимации по

времени и разрешим уравнения относительно $\eta^{p+1}, U^{p+1}, V^{p+1}$:

$$\begin{cases} \eta^{p+1} = -\tau(\delta_x \bar{U}^y + \delta_y \bar{V}^x)^p + \tau(R^\eta)^l + \eta^p \\ U^{p+1} = -\tau g H(\delta_x \bar{\eta}^y)^{p+1} + \tau(R^U)^l + U^p + \tau f V^p \\ V^{p+1} = -\tau g H(\delta_y \bar{\eta}^x)^{p+1} + \tau(R^V)^l + V^p - \tau f U^p \end{cases} \quad (14)$$

Здесь δ – оператор разностного дифференцирования, члены $(R^\eta)^l, (R^U)^l, (R^V)^l$ – фиксированы на шаге l . Решение (14) ищется с шагом $\tau \ll \Delta t$ на временном интервале $2\Delta t: [t^l, t^l + 2\Delta t]$, где t^l и Δt – момент времени и временной шаг трехмерной модели океана, соответственно. Количество шагов интегрирования равно $2 \cdot pl$, где $pl = \frac{\Delta t}{\tau}$. Начальные условия: $U^{p=0} = U^l$; $V^{p=0} = V^l$; $\eta^{p=0} = \zeta^l$.

Как упоминалось выше, уменьшение шага по времени для блока нахождения баротропной скорости соответствует увеличению числа итераций цикла решения системы уравнений мелкой воды, что, за счет необходимости межпроцессорных обменов на каждой итерации, ведет к тому, что простейшая явная схема решения уравнения мелкой воды становится узким местом программы с точки зрения параллельной реализации. В **разделе 2.2** описывается применение автором алгоритма с перекрытиями для решения системы уравнений мелкой воды на параллельных компьютерах с распределенной памятью (Калмыков, Ибраев, 2013). Алгоритм с перекрытиями рассматривался в ряде работ, например, для вычисления оператора Лапласа на регулярной сетке (Ding et al., 2001; Kjolstad et al., 2010) и тестируется всего на десятках вычислительных ядер компьютера. В данной работе алгоритм с перекрытиями применен к блоку решения уравнений мелкой воды для реальной модели Мирового океана высокого разрешения (Ибраев и др., 2011), использующей трехполярную сетку и выполняющейся на тысячах ядер. Масштабируемость модели представлена на Рис. 6. Модификация данной процедуры позволила устранить единственное параллельное «узкое место» модели Мирового океана.

Во **Третьей главе** приводится архитектура ПКСМ на всех уровнях: уровне комплекса, уровне совместной системы и уровне каплера. Программный комплекс состоит из трех основных частей (Рис. 5), представляющих этапы жизни любой физической модели: вычислительного блока построения интерполяционных весов и подготовки начальных данных; основного вычислительного блока – каплера и интерфейсов к нему; блока визуализации. На уровень глубже находится вычислительный блок ПКСМ, представляющий собственно совместную систему. Разработанная абстрактная архитектура совместной системы и ее драйвера являются расширением наиболее современной схемы с управляющей программой (Dennis et al., 2012) и позволяют сделать код пользователя полностью независимым от других моделей. Каплер и управляющая программа написаны для общего случая, что, во-первых, позволяет поддерживать несколько одновременных конфигураций совместной системы без изменения кода (например, для реального и файлового компонентов океана), а, во-вторых, обеспечить поддержку произвольного числа физических

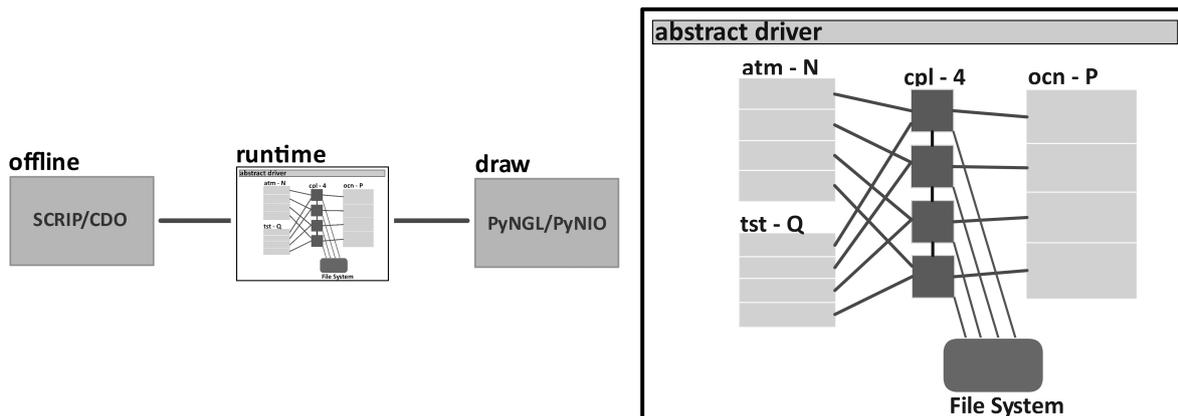


Рис. 5. Общая структура ПКСМ (слева) и схема работы совместной системы для примера 4-ядерного каплера и трех компонентов (справа).

моделей. В **разделе 3.3** приводится описание разработанной параллельной асинхронной системы ввода-вывода ПКСМ на основе делегатов-ядер каплера. Данная схема обеспечивает асинхронную работу модельного компонента за счет разделения множества ядер на вычислительные процессы и процессы ввода-вывода.

В **Четвертой главе** обсуждается практическое применение ПКСМ в отдельной версии математической модели Мирового океана ИВМ-ИО и совместной модели Мировой океан ИВМ-ИО-глобальная атмосфера ПЛАВ. В **разделе 4.1** описываются проведенные в рамках ПКСМ эксперименты по стандартному протоколу CORE (Coordinated ocean-ice reference experiment). Совместная модель имела вид системы Мировой океан ИВМ-ИО-атмосфера(CORE)-реки(CORE)-каплер. Целью численного эксперимента было воспроизведение внутригодовой изменчивости циркуляции вод Мирового океана под действием сезонного хода атмосферной циркуляции. Результаты эксперимента подробно описаны в работе (Ибраев, Калмыков, Ушаков, Хабеев, 2011). На Рис. 2 приведены только качественные характеристики воспроизводимых течений. График масштабируемости модели Мирового океана ИВМ-ИО под управлением ПКСМ представлен на Рис. 6. Максимальное число использованных ядер равнялось 32400. Параллельная эффективность модели Мирового океана ИВМ-ИО для максимального значения ресурсов составляет 78%. Очевидно, что для меньших чисел ядер данное число близко к единице, но интерес представляет именно эффективность выполнения программы на перспективных размерах вычислительных ресурсов.

В **разделе 4.2** приводится описание численного эксперимента по моделированию совместной циркуляции на основе моделей Мирового океана ИВМ-ИО и модели глобальной атмосферы ПЛАВ. Размеры расчетных сеток составляют $1440 \times 720 \times 49$ для океана и $1600 \times 864 \times 50$ для атмосферы. В качестве начального состояния океана использовалась контрольная точка, полученная с помощью разгона модели в течение 10 лет от климатологии Левитуса с граничными условиями CORE-I и дальнейшего расчёта с граничными условиями ERA-Interim от 01.01.1979 до 27.06.2011 – для эксперимента с летним прогно-

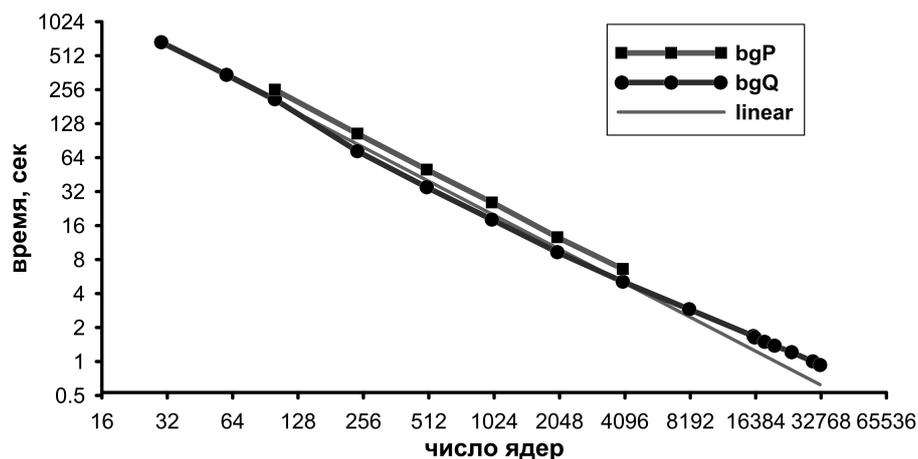


Рис. 6. Время работы 10 шагов модели Мирового океана ИВМ-ИО в зависимости от числа вычислительных ядер на суперкомпьютерах «BlueGeneP» (МГУ им. Ломоносова) и «BlueGeneQ» (IBM Research Center Thomas J. Watson).

зом, и до 23.02.2012 – для эксперимента с зимним прогнозом. Модель ПЛАВ стартовала с данных объективного анализа Гидрометцентра. Каждые 72 минуты данные пересылаются от атмосферы к океану, каждые 144 минуты – от океана к атмосфере. Тестирование проводилось на кластере ИВМ, суперкомпьютерах «МВС-10р», «МВС-100к», «Ломоносов». Совместная модель под управлением ПКСМ устойчиво работает и наряду с характерными для данных сезонов распределениями среднемесячных полей воспроизводит достаточно тонкие устойчивые элементы атмосферной и океанской циркуляции, такие как фронтальные зоны в горных районах (Анды, Гималаи), заток тёплых солёных средиземноморских вод в Северную Атлантику, районы отрыва западных прибрежных течений (Гольфстрим, Куросио). В мгновенных атмосферных полях воспроизводятся отдельные циклоны. Можно констатировать успешное воспроизведение совместной моделью мезомасштабной структуры полей в атмосфере и океане. На Рис. 3 представлены два среднемесячных прогностических поля для летнего и зимнего прогнозов.

Основные результаты работы

1. Разработана параллельная версия вычислительного алгоритма многоуровневой (поддерживающей произвольное число пар «компонент-компонент») интерполяции данных между моделями на произвольных логически-прямоугольных сетках. Получена лучшая скорость работы алгоритма по сравнению с существующими системами (CESM cpl7, МСТ, OASIS).
2. Для математической модели гидродинамики Мирового океана с разрешением 0.1° на трехполярной сетке разработана и реализована параллельная версия вычислительного алгоритма с перекрытиями для быстрого решения системы уравнений мелкой воды на массивно-параллельных компьютерах с распределенной памятью.
3. Разработана архитектура Программного комплекса совместного моделирования

- (ПКСМ) на основе абстрактного драйвера и библиотечного вида физических компонентов, расширяющая схему синхронизации через управляющую программу. ПКСМ включает разработанную параллельную асинхронную схему работы с файловой системой, не реализованную сегодня ни в одной системе совместного моделирования.
4. С применением ПКСМ реализована математическая модель гидродинамики Мирового океана с разрешением 0.1° и разработана совместная модель Мирового океана ИВМ-ИО и глобальной атмосферы ПЛАВ с разрешением 0.225° в атмосфере и 0.25° в океане, ориентированная на использование в среднесрочном и долгосрочном прогнозе. Такое разрешение в совместной модели достигнуто впервые в России.

Основные публикации автора по теме диссертации

1. Программный комплекс совместного моделирования (ПКСМ) является зарегистрированным программным средством (Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2013619320).
2. Калмыков В.В., Ибраев Р.А. Программный комплекс совместного моделирования системы океан–лед–атмосфера–почва на массивно-параллельных компьютерах // Вычислительные методы и программирование. 2013. 14. с. 88–95.
3. Калмыков В.В., Ибраев Р.А. Алгоритм с перекрытиями для решения системы уравнений мелкой воды на параллельных компьютерах с распределенной памятью // Вестник УГАТУ: науч. журн. Уфимск. гос. авиац. техн. ун-та. 2013. 17, № 5(58). с. 252–259.
4. Модели глобальной атмосферы и Мирового океана: алгоритмы и суперкомпьютерные технологии, Учеб. пособие / М.А. Толстых, Р.А. Ибраев, Е.М. Володин, К.В. Ушаков, В.В. Калмыков, А.В. Шляева, В.Г. Мизяк, Р.Н. Хабеев; Предисл.: В. А. Садовничий. – М.: Издательство Московского университета, 2013.
5. Калмыков В.В. Программный комплекс для модели Земной системы ИВМ РАН. Труды международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма», 23-28 сентября 2013, г. Новороссийск, пос. Абрау-Дюрсо, с. 554–561.
6. Толстых М.А., Калмыков В.В., Фадеев Р.Ю., Ушаков К.В., Ибраев Р.А. Совместная модель атмосферы, океана, морского льда и почвы высокого разрешения. Труды международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма», 23-28 сентября 2013, г. Новороссийск, пос. Абрау-Дюрсо, с. 408–409.
7. Толстых М.А., Ибраев Р.А., Калмыков В.В. Применение суперкомпьютерных вычислительных технологий в моделировании глобальной атмосферы и океана. Суперкомпьютерные технологии МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, 2012. 53с. Проект Комиссии при Президенте РФ по модернизации и технологическому развитию экономики России «Суперкомпьютерное образование».
8. Ибраев Р.А., Калмыков В.В., Ушаков К.В., Хабеев Р.Н. Вихреразрешающая $1/10^\circ$ модель Мирового океана. Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа: Сб. научн. тр. Вып. 25, том 2 / НАН Украины, МГИ, ИГН, ОФ ИнБЮМ. Редкол.: Иванов В.А. (гл. ред.) и др. – Севастополь, 2011. с. 30–44.