

气候模式并行计算*

毕训强 曾庆存

(中国科学院大气物理研究所, 北京 100080)

摘 要 气候模式并行计算是国内外最近重视开展的在大规模并行计算机上应用的并行软件的开发工作。近年来“气候动力学和气候预测理论的研究”国家攀登项目先后在国产曙光 1000 和曙光 1000A 并行计算机上开展了气候模式并行计算工作。所用的气候模式是气候动力学项目“八五”阶段设计发展的 9 层全球格点大气环流模式和从 1997 年起着手研制的 18 层全球格点大气环流模式。这是我国首次进行的气候数值模式并行计算工作, 阶段性工作取得了合理的并行效率。研究表明以大气环流模式为代表的气候模式是最适合并行计算机实际应用的科研任务之一, 国产并行计算机有能力在该领域实际应用中发挥作用。

关键词 大气环流模式 并行计算机 气候模式 并行计算

1 引言

气候异常和气候变化是全球热点问题之一。对气候变化及其预测的气候模式设计和模拟研究一直是当代气候研究中的一个非常关键的环节, 是研究复杂气候系统的最重要途径之一, 也是衡量一个国家气候研究水平的重要标志。近年来, 国内外气候研究都充分认识到高分辨率高精度的气候模式对改善气候预测水平的重要性, 并着手建立或完善其高分辨率、物理过程参数化方案更为完备细致的新一代气候模式。这些工作使得新一代气候模式的长时间气候模拟试验所需要的巨大量的计算速度和内存资源, 超出了单个计算处理器(包括向量计算机)的承受能力。国际上一些大气科学研究机构, 已开始(或刚刚实现)把他们的气候模式移植到大规模并行计算机上^[1~3]。

气候模式的发展很大程度上取决于电子计算机的发展水平。“八五”阶段我国开展的“气候动力学及气候预测理论的研究”攀登计划项目^[4], 通过派出气候模式设计专家利用国外先进计算机资源以及使用从国外进口的中型计算机, 已基本建立起我国自己设计的气候系统各分系统(大气环流、海洋环流、陆面和地表过程)的动力学模式, 完成了各分系统模式的耦合和组装, 且都通过了大规模的模拟检验并已应用在夏季旱涝跨季度预测和二氧化碳倍增造成全球气候变化预测及气候数值模拟研究之中。这些模式的垂直分辨率和物理过程方案细致程度与国际同期气候模式相当, 设计思想具有许多优点和特色, 综合模拟能力赶上了国际同期先进气候模式的模拟水平。但因为国内计算机资源有限, 我国气候模式应用强度远不如国外发达国家, 这在一定程度上削弱了我国气候模式在国际气候研究中的影响。

1997-05-29 收到, 1997-06-17 收到修改稿

* 本工作得到国家基础性研究重大项目“气候动力学和气候预测理论研究”与国家 863 项目 863-306-ZD-01-9 课题的资助

计划中的“气候动力学及气候预测理论的研究”攀登计划项目“九五”阶段研究的核心内容是建立和研制发展新一代高分辨率高精度大气、海洋、陆面、冰雪圈耦合的气候模式,模式复杂性程度和计算量都比现有模式大了很多。面临计算机资源严重不足的现状,开展气候模式并行计算尤为必要。本文第2部分将介绍并行计算概念与气候模式并行计算基本方法;第3、4部分则分别介绍“八五”阶段后期我们在国产曙光1000并行机上NX并行环境下实现的9层全球格点大气环流模式并行计算和最近在国产曙光1000A并行机上PVM并行环境下实现的18层全球大气环流模式并行计算。

2 并行计算概念与气候模式并行计算基本方法

并行计算是将单一计算任务分配到多个计算处理器去完成。衡量并行计算效率的并行加速比定义为

$$S_p = \frac{t_{\text{seq}}}{t_p},$$

其中, t_{seq} 为用串行机完成该任务所需的时间, t_p 为用 p 个处理器并行完成该任务所需的时间。

对于一个特定的计算任务,设该任务中不能并行只能串行执行的运算量占总运算量的百分比为 s ,可并行执行的运算量百分比为 $1-s$,则(负载完全平衡且忽略并行系统额外开销时的)并行加速比满足 Amdahl 定律:

$$S_p = \frac{1}{s + \frac{(1-s)}{p}} = \frac{p}{sp + 1 - s} \leq \frac{1}{s}.$$

就气候模式并行计算而言,只能串行运算量百分比 s 随模式分辨率和模式物理过程细致程度的提高而减小,所以气候模式并行计算能取得的最大并行加速比也逐渐增大,而且呈现出多处理器时并行加速比接近线性增长的结果。Hack 等^[2]及 Leslie 等^[3]的工作都取得了16个处理器并行计算加速比13以上的结果。

区域分解方法是进行气候模式并行编程常采用的基本方法。通过沿经向(或纬向)的带状(或块状)分割,整个大区域(或全球)模式计算量能很自然地分配到多个处理器上进行,每个处理器只计算各自带(或块)内部分,在需要时与其它处理器发生通讯。对以有限差分方法求解的格点模式,通讯主要发生在动力框架部分计算中需要相邻带数据时。谱模式中的通讯主要发生在需要高斯求积和快速富里叶变换时。由于谱模式中谱空间中谱系数间的计算并行效率不高,在同等模式分辨率下,格点模式比谱模式并行加速比稍高,也易于进行程序并行化移植。

过程分解方法是近年来利用共享内存并行机在区域分解方法基础上提高气候模式并行效率采用的方法。这主要是因为气候模式几大类物理过程(如降水、辐射、摩擦过程)间的计算很少同时关联,可并行计算;海洋与大气耦合模式中采用海洋和大气的同步耦合方式(替代目前常采用的异步耦合方式)可实现海洋、大气两大系统间的并行计算。

3 在曙光 1000 上实现的 IAP 9 层大气环流模式并行计算

1995 年 4 月, 国家 863 计划中的重中之重项目研制出曙光 1000 大规模并行处理 (MPP) 并行机。该并行机基于 Message-Passing 机制的松散耦合结构, 包括 32 个基于 iPSC860 的计算节点, 2 个系统服务节点子系统和 2 个 I/O 节点组成的外存子系统。这些节点由一个的 2 维 Wormhole 路由器网连接。系统内存总容量 1 GB (每个节点 32 MB)。网络总通讯容量为 4.8 GB/s (相邻节点间传输带宽 33 MB/s)。单精度峰值计算速度 2.5 Gflops。该机支持 NX、PVM、EXPRESS 等并行环境运行 FORTRAN (或 C) 并程序。

中国科学院大气物理研究所 (IAP) 9 层大气环流模式是“八五”阶段国家攀登计划“气候动力学和气候预测理论的研究”在气候设计和发展方面最主要研究成果之一^[5]。该模式是一个包括对流层和低层平流层的原始方程全球格点有限差分模式。模式依照实际大气热力学变量全球平均的垂直廓线作为模式标准大气, 而将温度、位势高度和地面气压等热力学变量相对于这个标准的偏差作为预报量, 有助于减少计算误差, 尤其是减小了一般方案在计算陡峭地形处气压梯度力时常有的大计算误差; 模式动力框架能满足差分方程组与微分方程组各种物理系数整体性质, 内部协调, 计算稳定。模式择优选用和改进发展了国际模式中采用的完备、细致的物理过程参数化方案。该模式各部分具有可移植性、兼容性和计算稳定性。长时间数值积分结果表明该模式所模拟的各月平均气候状态、季节循环、气候类型分类及区域气候与观测相符, 已能相当可靠地供大规模气候模拟和气候预测研究使用^[4~10]。

大气环流模式的计算量主要在动力框架和物理过程两大部分。在 IAP 9 层大气环流模式中, 辐射传输、云和降水过程、摩擦项及地表面能量收支等计算模式方程组中源汇项的物理过程参数化方案占全部计算量的 67%, 由动力框架和水汽平流组成的模式动力框架部分的计算占全部计算量的 18%。模式物理过程部分计算的共同特点是只在每个气柱内计算, 相邻气柱间的水平方向联系只通过模式动力框架来实现, 这种水平方向格点间物理过程计算时的互不相关性使我们能够实现高效率的气候模式并行计算。

我们采用区域分解方法实现了 IAP 9 层大气环流模式在曙光 1000 上 NX 并行环境下的并行计算。首先将全球计算格点分割成东西 (纬向) 方向的条状格点分布, 不同计算结点承担各自条状带内所需的计算工作。模式动力框架每个时步开始时调用信息传递命令进行相邻纬向条状带 (南北) 边界上数据更新。

设我们用 N 个计算结点, 则原始数组 $A(72, 46)$ 可分割为 $A(72, M)$, 其中

$$M = \frac{(46 + 2)}{N} + 2,$$

这样, 对于不同数目的 N , 如 N 取 2、4、8、16 时, 不同数目计算结点的并程序基本相近, 并程序差别只是与模式中极区滤波方案有关的几个子程序。对纬向条状格点带分割, 我们在曙光 1000 上所能用到的最多合理结点数目是 23。由模式原始串行程序到并程序, 总共 120 个子程序中的约 40 个与模式动力框架有关的子程序要添加并行

计算所需的信息传递语句。

表 1 给出了 IAP 9 层大气环流模式串行和并行程序在曙光 1000 上积分 1 d 的内存占用和运行时间、相应的并行加速比和单节点利用效率。对 2、4、6、16 和 23 个计算节点, 我们取得的并行加速比分别为 1.71、2.65、4.30、5.90 和 7.23。

表 1 IAP 9 层大气环流模式在曙光 1000 上积分 1 d 的并行性能

模式分辨率 72×46×9	(72,46) 单节点	(72,26) 2 节点	(72,14) 4 节点	(72,8) 8 节点	(72,5) 16 节点	(72,4) 23 节点
占用内存 / MB	25.5	15.9	10.2	7.2	5.9	5.4
运行时间 / s	4320	2526	1630	1005	732	597
加速比	1.0	1.71	2.65	4.30	5.90	7.23
单节点效率	1.0	0.855	0.663	0.538	0.38	0.314

4 在曙光 1000A 上实现的 18 层大气环流模式并行计算

1997 年 2 月, 国家 863 计划中的重中之重项目研制出曙光 1000A 大规模并行处理 (MPP) 并行机。该并行机是由 16 个 133 MHz 主频的曙光天演 Power PC 工作站组成的工作站集群。系统内存总容量 2 GB (每个节点 128 MB)。计算节点间通讯由快速以太网 (100 MB/s) 连接, 节点间传输带宽 10 MB/s。单精度峰值计算速度 4.25 Gflops。系统支持 PVM、MPI 标准并行环境运行 FORTRAN (或 C) 并行程序。

我们在曙光 1000A 上进行并行计算使用的气候模式是“气候动力学和气候预测理论的研究”攀登项目计划于“九五”阶段研制的一个 18 层全球大气环流模式的雏形。该模式在动力框架和计算格式方面继承了 IAP 9 层大气环流模式的许多优点, 气候动力学项目“八五”阶段在大气环流模式物理过程参数化方案方面的一些最新研究进展也将在该模式中采用。模式垂直坐标采用普遍适合的归一化坐标, 该垂直坐标能很方便地变换为混合 p - σ 或 η 坐标。模式水平方向采用可灵活选取的多种水平分辨率。已实现的 4 种水平分辨率的模式下边界数据 (基于美国国家大气研究中心谱模式原有下边界数据准备而成) 的水平网格距分别为: $22.5^\circ \times 22.5^\circ$ 、 $5.625^\circ \times 5.625^\circ$ 、 $3.75^\circ \times 3.75^\circ$ 和 $2.8125^\circ \times 2.8125^\circ$ 。

采用与前面类似的区域分解方法, 我们实现了 18 层大气环流模式在曙光 1000A 上 PVM 并行环境下的并行计算。通讯部分采用了美国国家大气研究中心气候模式中的一些避免通讯冲突技术。表 2~5 分别给出了 4 种水平分辨率的模式用不同数目处理器积分 1 d 所需运行时间、相应的并行加速比和 CPU 利用效率, 其中:

$$\text{CPU 利用率} = (\text{用户时间} + \text{系统时间}) / \text{运行时间},$$

$$\text{并行加速比} = \text{单节点运行时间} / \text{多节点运行时间}.$$

对水平网格距为 $22.5^\circ \times 22.5^\circ$ 的 18 层模式, 2、4、8 个计算节点的并行加速比分别为 1.68、2.46、2.16。对水平网格距为 $5.625^\circ \times 5.625^\circ$ 的 18 层模式, 2、4、8、16 个计算节点的并行加速比分别为 1.61、2.77、4.55、4.59。对水平网格距为 $3.75^\circ \times 3.75^\circ$ 的 18 层模式, 2、4、6、8、12、16 个计算节点的并行加速比分别为 1.56、2.91、4.26、

表 2 模式用不同数目处理器积分 1 d 的并行效能

模式分辨率 16×9×18	(16,9) 单节点	(16,6) 2 节点	(16,4) 4 节点	(16,3) 8 节点
用户时间 /s	96.4	48.7	24.3	14.5
系统时间 /s	0.1	1.6	1.05	0.9
运行时间 /s	98.2	58.4	40.0	45.5
CPU 利用率	98.3%	86.1%	63.4%	32.4%
并行加速比	1.0	1.68	2.46	2.16

表 3 模式用不同数目处理器积分 1 d 的并行效能

模式分辨率 64×33×18	(64,33) 单节点	(64,18) 2 节点	(64,11) 4 节点	(64,6) 8 节点	(64,4) 16 节点
用户时间 /s	1539	765.6	374.2	183.1	98.77
系统时间 /s	0.5	16.4	11.4	8.5	4.75
运行时间 /s	1541.3	955.7	556.3	338.8	335.9
CPU 利用率	99.9%	81.8%	69.3%	56.6%	30.8%
并行加速比	1.0	1.61	2.77	4.55	4.59

表 4 模式用不同数目处理器积分 1 d 的并行效能

模式分辨率 96×49×18	(96,49) 单节点	(96,26) 2 节点	(96,14) 4 节点	(96,10) 6 节点	(96,8) 8 节点	(96,6) 12 节点	(96,4) 16 节点
用户时间 /s	3479.9	1812	863.3	570.5	430	287.9	212.4
系统时间 /s	0.8	36.4	21.0	17.5	16.6	14.7	9.3
运行时间 /s	3481	2229	1195	818	747	734	620
CPU 利用率	99.99%	82.9%	74.0%	71.9%	60.0%	41.2%	35.8%
并行加速比	1.0	1.56	2.91	4.26	4.66	4.74	5.61

表 5 模式用不同数目处理器积分 1 d 的并行效能

模式分辨率 128×65×18	(128,65) 单节点	(128,34) 2 节点	(128,18) 4 节点	(128,10) 8 节点	(128,6) 16 节点
用户时间 /s	6696.0	3242	1551	775.6	385.7
系统时间 /s	6.8	61.9	41.9	42.2	18.2
运行时间 /s	20551(6703)	4014.0	2176	1361.0	1202.0
CPU 利用率	32.0%(100%)	82.3%	73.2%	60.1%	33.6%
并行加速比	(1.0)	5.12(1.67)	9.44(3.08)	15.1(4.93)	17.1(5.58)

4.66、4.74、5.61。由于最高水平分辨率（水平网格距为 $2.8125^{\circ} \times 2.8125^{\circ}$ ）的 18 层模式的运行需要很大内存（约 250 MB），超出了曙光 1000A 单个节点所能提供的 128 MB，在单节点上作串行程序计算时必须要把硬盘作缓冲内存使用，这就很大程度影响了计算机效率（仅为 32%）多节点并行计算时没有内存不足问题。对水平网格距为 $2.8125^{\circ} \times 2.8125^{\circ}$ 的模式，2、4、8、16 个计算节点的并行加速比分别为 5.12、9.44、15.1、17.1，这种超线性加速比是因为模式单节点串行计算时计算机内存不足造成的。扣除内存不足因素，假设单节点串行计算时 CPU 利用率为 100%，则可以估计出对水平网格距为 $2.8125^{\circ} \times 2.8125^{\circ}$ 的模式，2、4、8、16 个计算节点的并行加速比分别为 1.67、3.08、4.93、5.58。

由上面 4 个表可知, 在 8 个计算节点上并行运算 4 种水平分辨率气候模式(分辨率由小到大) 时的并行加速比分别为 2.16、4.55、4.66 和 4.93。可以看出随着模式水平分辨率和计算量增大并行加速比也增大的趋势。对最高水平分辨率(水平网格距为 $2.8125^{\circ} \times 2.8125^{\circ}$) 模式而言, 8 个计算节点上并行运算积分 1 d 需要 22 min, 进行一个积分 6 个月的夏季旱涝跨季度预测试验可以在 3 d 内完成。而在单处理器曙光天演 Power PC 工作站上进行同样试验则需要 15 d。这说明气候模式并行计算是“九五”阶段研制发展高分辨率高精度气候模式同时必须要开展的研究工作。在现阶段, 曙光 1000A 并行机已基本可以满足我们用高水平分辨率模式作跨季度预测试验的要求。

在曙光 1000A 并行机中, 计算结点间通讯速度慢(总带宽 100 MB/s, 结点间带宽 10 MB/s) 很大程度上限制了多处理器时并行加速比的提高。同样的任务分配到多处理器后, 通讯开销就成了制约并行加速比提高的瓶颈。最近, 千兆位以太网标准的推出使我们可以期待在不远的将来, 由工作站集群形式组成的并行机也能发挥很大作用。

5 结语

“气候动力学和气候预测理论的研究”国家攀登项目近年来先后在国产曙光 1000 和曙光 1000A 并行计算机上开展了气候模式并行计算工作。所用的气候模式是气候动力学项目“八五”阶段设计发展的 9 层全球格点大气环流模式和今年起着手研制的 18 层全球格点大气环流模式。阶段性工作取得了合理的并行效率, 两台并行机上用 8 个处理器时的并行加速比都有 4 倍多。

发展新一代高分辨率气候模式需要大量的计算机资源, 需要通过进行气候模式并行计算去实现。并行计算机也有着随着模式水平分辨率和计算量的增加并行加速比逐渐增大的特点。这就使得气候模式并行计算成为近期国内外气候模式研制和并行计算机应用两个研究领域都重视开展的研究工作。由于我国计算机资源远远落后于国外先进水平, 气候模式的并行计算研究是我国研制发展高性能高分辨率高精度气候模式应该选取的道路。

国产曙光 1000 和曙光 1000A 并行机可以满足国内现阶段气候模式研制及气候数值模拟的需要, 特别是曙光 1000A 并行机已可以基本满足我们用高水平分辨率作跨季度汛期降水异常预测试验的要求。

与国外同类工作先进水平相比, 本项工作所取得的并行加速比还有一定差距。曙光 1000 系列并行机的通讯速度指标较国外同类工作所用并行机有一定差距。我们对全球计算格点只作沿纬向的区域分割一定程度上造成太阳短波辐射及积云对流降水部分计算量在计算节点间负载不平衡, 影响了并行加速比(特别是多个处理器时) 的提高。在下一步工作中, 我们准备添加沿经向的区域分割来减少计算节点间计算量负载不平衡, 以争取获得更高的并行加速比。

致谢 作者感谢国家智能计算机研究中心提供的曙光 1000 系列并行计算机及并行技术支持, 感谢美国国家大气研究中心(NCAR) 授权使用的气候模式 CCM3 并行版本给予本项工作的 PVM 并行编程环境下避免通讯冲突的技术帮助。

参 考 文 献

- 1 Mechoso, C.R., C.-C. Ma, J.D. Farara, J.A. Spahr and R.W. Moore, 1993, Parallelization and distribution of a coupled atmosphere-ocean general circulation model, *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 2062~2076.
- 2 Hack, J.J., J.M. Rosinski, D.L. Williamson, B.A. Boville and J.E. Truesdale, 1995, Computation design of the NCAR community climate model, *Parallel Computing*, **21**, 1545~1569.
- 3 Leslie L.M. and K. Fraedrich, 1997, A new general circulation model: formulation and preliminary results in a single- and multi-processor environment, *Climate Dynamics*, **13**, 35~43.
- 4 曾庆存、郭裕福, 1995, 气候动力学和气候预测理论的研究, 中国十大基础研究, 上海科技出版社, 111~152.
- 5 曾庆存、袁重光、张学洪、梁信忠、张荣华、毕训强、包宁, 1995, IAP 气候模式及其应用, 自然科学进展, **5**(2), 130~138.
- 6 Zhang Xuehong, 1990, Dynamical framework of IAP nine-level atmospheric general circulation model, *Adv. Atmos. Sci.*, **7**(1), 66~77.
- 7 毕训强, 1993, IAP 九层大气环流模式及气候数值模拟, 中国科学院大气物理研究所博士论文, 210p.
- 8 毕训强、曾庆存, 1994, IAP 九层大气环流模式的初步结果, 灾害性气候的模拟和预测, 北京: 气象出版社, 118~127.
- 9 Liang Xinzong, 1996, Description of a nine-level grid-point atmospheric general circulation model, *Adv. Atmos. Sci.*, **13**(3), 269~298.
- 10 Bi Xunqiang, 1997, Parallel computing of a climate model on DAWN 1000 by Domain Decomposition Method, *Adv. Atmos. Sci.*, **14**(4).

Parallel Computing by Using Climate Models

Bi Xunqiang and Zeng Qingcun

(Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract Parallel computing by using climate models is an important research area of application software development on massive multi-processor computer in the world. In this paper, we introduced two steps of the parallel computing by using climate models developed by national key project "Climate Dynamics and Climate Prediction" on Dawning 1000 and Dawning 1000A parallel computer developed by the national 863 project. The climate models we used include a nine-level global grid-point atmospheric general circulation model developed by the key project three years ago and an eighteen-level global grid-point atmospheric general circulation model which is under development by the key project at present. As a first research on the parallel computing of numerical climate modelling in China, our results are quite promising, and we get the reasonable speed-up ratio. The work demonstrates that the climate models on behalf by atmospheric general circulation model is a good task to make real application on parallel computer, and the Dawning massive parallel computer is available to play a role in this field.

Key words atmospheric general circulation model parallel computers parallel computing climate models