

文章编号: 1001-2486(2003)02-0041-05

二维浅水波并行模式的伴随^{*}曹小林¹, 宋君强², 孙安香²

(1. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088; 2. 国防科技大学计算机学院, 湖南长沙 410073)

摘要:以二维浅水波为例, 详细探讨如何开发并行模式的切线性模式和伴随模式。切线性模式的并行机制和原始模式一致, 而伴随模式不同。三个模式采用一致的数据剖分方法可提高并行效率。在集群并行计算机系统上采用一维数据剖分, 切线性模式的通信量与原始模式相当, 而计算量几乎是原始模式的 2 倍; 伴随模式的通信量大约是原始模式的 2 倍, 而计算量几乎是原始模式的 3 倍。在三个模式中, 切线性模式的加速比最大。

关键词:并行模式; 切线性模式; 伴随模式; 计算量; 通信量

中图分类号: TP301.6 **文献标识码:** A

Adjoint Model of 2-D Parallel Shallow Water Model

CAO Xiao-lin¹, SONG Jun-qiang², SUN An-xiang²

(1. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100083, China;

2. College of Computer, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: This paper discusses how to develop adjoint model (ADM) and tangent linear model (TLM) of the parallel model based on shallow water equation. The parallel strategy of TLM is the same as the original parallel model. Parallel strategy of ADM is different. The three adopt uniform domain decomposition in order to improve the parallel efficiency. One domain decomposition is adopted on cluster parallel computer system. The computing cost of TLM is about as double as the original model and ADM's is about 3 times as that. The communication cost of ADM is about as double as the original parallel model. The speed-up of TLM is the best among three models.

Key words: parallel model; tangent linear model; adjoint model; computing cost; communication cost

自 20 世纪 90 年代中期以后, 随着高性能并行计算机的发展, 并行计算在数值天气预报领域得到广泛的应用。数值天气预报是除军事用途外的高性能并行计算机需求最大的领域之一。如代表当前气象领域最先进的技术的四维变分资料同化需要在千亿次甚至万亿次高性能并行计算机上运行^[1], 这是国际高性能计算和气象技术研究前沿。

四维变分资料同化^[2]的计算量主要在于三个模式的运行, 分别为原始预报模式、原始预报模式的切线性模式和原始预报模式的伴随模式。后两个模式是在原始预报模式的基础上发展起来的。一般直接从源代码进行转换得到, 既可采用手工转换, 也可用自动微分工具 (TAMC^[3] 和 ODYSSEE^[4]) 转换。对于串行程序, 这些技术已经比较成熟, 但对于并行模式, 仍然存在很多问题。如现在仍然没有一个自动微分工具能完全转换并行程序。

当今各国国家气象局的业务化预报模式绝大多数是并行模式, 如 ECMWF 的 T213、美国 NCAR 的 MM5、中国国家气象局的 T106。这些并行模式不仅提高了预报的精度和准确率, 而且满足了实时性要求。如在此基础上建立四维变分资料同化系统, 必然要开发并行模式的切线性模式和伴随模式。

1 二维浅水波模式

在直角坐标系下, 二维浅水波方程为^[5]:

* 收稿日期: 2002-09-29

基金项目: 国家部委基金项目资助 (2001BA607B02)

作者简介: 曹小林 (1974-), 男, 博士后。

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(pu)}{\partial x} + \frac{\partial(pv)}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (1)$$

其中, u 和 v 分别为 x 和 y 方向的水平速度; p 为位势。在矩形区域 $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$ 内求解该方程。

定义旋度

$$\xi = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \quad (2)$$

并设 $U = pu, V = pv, Z = \frac{\xi}{p}$, 代入(1)式得

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - ZV + \frac{\partial H}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + ZU + \frac{\partial H}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

其中 $H = p + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)$ 。变量 u, v, p, U, V 满足周期边界条件, 初始速度场满足平衡条件

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad \text{和} \quad \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} \mathbf{V} = 0$$

由此定义流函数

$$\phi = A \sin \frac{2\pi x}{b-a} \sin \frac{2\pi y}{d-c}$$

则二维浅水波方程的初始条件为

$$u(x, y, 0) = -\frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (4a)$$

$$v(x, y, 0) = \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (4b)$$

$$p(x, y, 0) = \frac{A^2}{4} \left[\left(\frac{2\pi}{d-c} \right)^2 \cos \frac{4\pi x}{b-a} + \left(\frac{2\pi}{b-a} \right)^2 \cos \frac{4\pi y}{d-c} \right] + p_0 \quad (4c)$$

其中 p_0 为常数。

模式计算采用矩形网格。计算变量 p 和 H 在整数网格点上, u, v, Z, U, V 在半整数网格点。时间积分采用“蛙跳格式”^[5]。考虑到计算稳定性的要求, 在每个时间步采用了时间平滑。

2 二维浅水波并行模式

对于并行计算, 特别是对目前广泛使用的 SPMD 方式并行计算而言, 数据剖分是一个至关重要的问题, 它的好坏直接涉及到并行计算效率。良好的数据剖分应该满足三个要求: (1) 计算负载平衡; (2) 最大限度的局部计算和尽量少的通信; (3) 尽量避免冗余计算。

在二维浅水波并行模式中, 沿 X (或 Y) 方向采用一维数据剖分(见图 1)。这是由于: (1) 采用差分方法求解二维浅水波方程时, 在同一个时间层上, 每个变量仅和它相邻的点有关, 仅需要相邻节点间的边界数据交换; (2) 采用一维剖分, 并行计算具有简单、高效的通信结构。由于每个模式变量均满足周期边界条件, 所以所有节点可采用一致的通信方式。

由于二维浅水波模式采用规则的二维网格, 并基于显示差分法求解微分方程, 这就使得模式计算具有良好的可扩展性。在每个时间积分步后各处理机都必须借助其邻居更新边界数据, 这种基于差分的

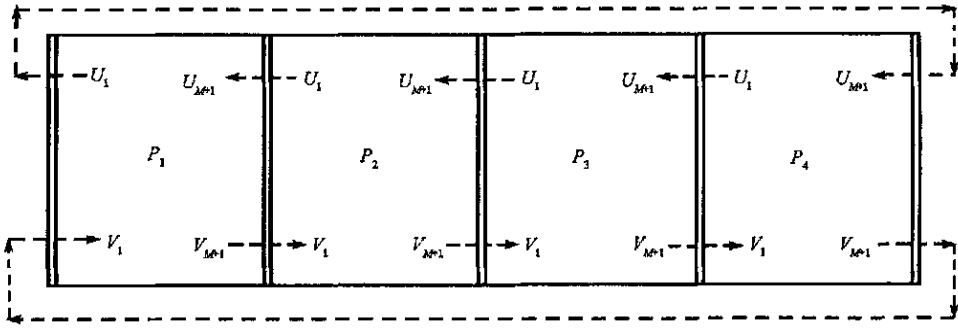


图1 一维剖分及其边界通信

Fig. 1 One dimensional decomposition and its boundary data communication

并行计算才能继续。我们在此定义边界为每个区域的最左边(或最右边)一列网格。它和其相邻区域的最右边(或最左边)一列网格重叠。在所有区域中,速度 U 的最右边一列数据没有计算,因而在每个时间积分步后,它需要右边的节点传送第 1 列数据给它。相反,对于速度 V ,它需要左边的节点传送最后一列(第 $M+1$ 列)数据给它。由于满足周期边界条件, P_4 节点中的最后一列数据和 P_1 节点中的第一列数据相等(如图 1 所示),所以它们之间的数据交换和其它相邻节点之间的数据交换一致。另外,程序先计算边界上的网格点,然后立即传送,再计算区域内部的点,从而使得计算与通信重叠^[6],提高并行效率。

基于上述分析,我们采用 MPI 并行软件平台,实现了基于一维剖分的二维浅水波模式并行计算。并行计算设计主要分为三个部分:(1)基于数据剖分方法,确定每个区域的左右边界;(2)确定边界数据交换的时机与消息传递机制;(3)初始数据分配与数据收集。

为了检测二维浅水波并行模式的并行计算性能,在由 100M bps 以太网互联的 8 处理机微机集群系统上运行该模式。每个处理机的主频为 1.7GHz,内存为 512MB,Cache 为 256KB。测试出两种网格规模的并行计算效率(见表 1)。一个是 256×256 个网格点,另外一个为 512×512 个网格点,均积分 60 步。由表 1 看到,网格规模固定时,随着处理机数目的增加,并行效率有一定的下降;对相同处理机数,网格规模扩大时,加速比也增大,这是因为并行计算需要一定量的通信;当网格规模固定而处理机数增大时,通信开销增大而计算量增加很少;当处理机数不变而网格规模加大时,相比计算量增大而言,通信开销增加得较少,所以加速比增大。

表 1 二维浅水波模式在集群系统上的并行计算效率

Tab. 1 Parallel speedup of 2-D shallow water model on cluster

处理机数	网格规模 256×256			网格规模 512×512		
	1	2	4	1	2	4
墙钟时间(s)	0.7528	0.4725	0.2936	3.2211	1.8782	1.1271
加速比	1.0000	1.5932	2.5640	1.0000	1.7150	2.8579
并行效率	100.0%	79.6%	64.1%	100.0%	85.8%	71.2%

3 并行切线性模式和并行伴随模式

原始模式和切线性模式以及伴随模式之间需要进行数据传递。这要求我们在作并行时,需要从总体考虑三个模式的并行策略,而不是提高单个模式的并行效率而忽略整体并行效率。

在切线性模式中,每个格点上变量的计算也仅与相邻格点有关,可采用与原始模式同样的数据剖分方法。而且切线性模式和原始模式的计算顺序一致,所以可采用与原始模式一致的并行机制。与原始模式不同的是,在并行切线性模式运行时,在不同节点间需要传递一些中间变量及其导数。如果采用一个消息传递^[7],那么它们一定要被打包在一起(如图 2)。

发送:	接收:
PACK(CU, MSG)	RECV(MSG, TAG, INFO)
PACK(g_CU, MSG)	CU = UNPACK(MSG)
SEND(MSG, DEST, TAG)	g_CU = UNPACK(MSG)

图2 采用一个消息传递变量及其导数的伪代码

Fig. 2 Pseudocode for one message passing variable and its associated derivative

伴随模式与原始模式的计算顺序刚好相反,需要重新设计并行算法。由于伴随模式代码是由切线性模式代码转置得到,因此每个格点上伴随变量的计算也仅与相邻格点有关,可同样采用一维数据剖分方法,但需要传送的数据有些差别。在原始模式和切线性模式中,只需用有数据的边界去覆盖无数据的边界,因为它们是相等的关系。如对速度扰动 g_vnew ,使用下面的代码就可实现边界上的数据更新:

```
CALL MPI_SEND( g_vnew( 1, m+ 1), np1, MPI_REAL, nright, tag, MPI_COMM_WORLD, IERR)
```

```
CALL MPI_RECV( g_vnew( 1, 1), mp1, MPI_REAL, nleft, tag, MPI_COMM_WORLD, ISTATUS, IERR)
```

在伴随模式中,相邻边界上的数据是叠加关系,因为边界两边的网格都对边界上的数据有贡献,所以应使用以下代码来实现边界数据更新:

```
CALL MPI_SEND( ad_vnew( 1, m+ 1), np1, MPI_REAL, nright, tag, MPI_COMM_WORLD, IERR)
```

```
CALL MPI_RECV( vtemp( 1), mp1, MPI_REAL, nleft, tag, MPI_COMM_WORLD, ISTATUS, IERR)
```

```
do i= 1, np1
```

```
    advnew( i, 1) = advnew( i, 1) + vtemp(i)
```

```
enddo
```

```
CALL MPI_SEND( ad_vnew( 1, 1), np1, MPI_REAL, nleft, tag1, MPI_COMM_WORLD, IERR)
```

```
CALL MPI_RECV( ad_vnew( 1, m+ 1), np1, MPI_REAL, nright, tag1, MPI_COMM_WORLD, ISTATUS, IERR)
```

其中 $np1$ 为一列上的数据个数。所以伴随模式中的通信量几乎是切线性模式的两倍。

由于切线性模式和伴随模式的运行均需要原始模式每步积分得到的状态量,在原始模式运行时,把每个结点上计算得到的该区域格点上的模式状态量存储在本地内存或文件中,因此要求切线性模式和伴随模式应采用与原始模式一致的数据剖分方法,每个节点计算的区域和网格点数与原始模式一致。于是,在切线性模式和伴随模式运行时仅需要从本地内存或文件中提取原始状态量,从而避免在各个结点之间传递原始状态量,提高并行效率。

为了检测切线性模式和伴随模式的并行计算性能,我们在由 100M bps 以太网互联的 8 处理机微机集群系统上运行该模式。每个处理机的主频为 1.7GHz,内存为 512MB,Cache 为 256KB。测试出两种网格规模的并行计算效率,一个是 256×256 个网格点(见表 2),另外一个为 512×512 个网格点(见表 3),均积分 60 步。

表2 三个模式在集群系统上的并行计算效率(网格规模 256×256)Tab. 2 Parallel speedup of three models on cluster(Grid scale 256×256)

处理机数 模式	1		2		4	
	墙钟时间(s)	墙钟时间(s)	加速比	墙钟时间(s)	加速比	墙钟时间(s)
原始模式(s)	0.7528	0.4725	1.5932	0.2936	2.5640	
切线性模式(s)	1.4748	0.8273	1.7827	0.5654	2.6084	
伴随模式(s)	2.0661	1.3638	1.5150	0.8169	2.5292	

表 3 三个模式在集群环境下的并行计算效率(网格规模 512×512)Tab. 3 Parallel speedup of three models on cluster(Grid scale 512×512)

处理机数 模式	1		2		4	
	墙钟时间(s)	墙钟时间(s)	加速比	墙钟时间(s)	加速比	墙钟时间(s)
原始模式(s)	3.2211	1.8782	1.7150	1.1271	2.8579	
切线性模式(s)	6.3049	3.2814	1.9214	2.0135	3.1313	
伴随模式(s)	9.4093	5.8183	1.6172	3.2377	2.9062	

由表 2、表 3 可看到, 网格规模固定时, 随着处理机数目的增加, 切线性模式和伴随模式的并行效率有一定的下降; 对相同处理机数, 网格规模扩大时, 加速比也增大。这与原始模式是相同的。从两表可看出, 切线性模式的加速比最大, 其次是原始模式。但当网格规模增大到 512×512 时, 用 4 个处理机计算, 伴随模式的加速比比原始模式大。这主要是因为, 切线性模式的通信量与原始模式相当, 而计算量几乎是原始模式的 2 倍。伴随模式的通信量是原始模式的 2 倍, 而计算量几乎是原始模式的 3 倍。所以随着网格规模的扩大, 伴随模式的加速比超过了原始模式。

4 结束语

以二维浅水波为例讨论如何开发并行模式的切线性模式和伴随模式。在有限区域内用有限差分法求解笛卡尔坐标下的二维浅水波方程, 在时间上采用蛙跳格式。由于每个格点上变量的计算仅与相邻格点有关, 因而可对其进行数据剖分方法以实现并行性。切线性模式和原始模式的计算顺序一致, 可采用与原始模式一致的并行机制。而伴随模式运行顺序与原始模式相反, 需要重新设计并行机制。三个模式采用一致的数据剖分方法可提高并行效率。采用一维数据剖分, 切线性模式的通信量与原始模式相当, 而计算量几乎是原始模式的 2 倍, 所以加速比大。伴随模式的通信量大约是原始模式的 2 倍, 而计算量几乎是原始模式的 3 倍。所以随着网格规模的扩大, 伴随模式的加速比超过了原始模式。

参考文献:

- [1] 廖洞贤, 王两铭. 数值天气预报中的若干新技术[M]. 北京: 气象出版社, 1995.
- [2] Courtier P, Thepaut J N, Hollingsworth A. A Strategy for Operational Implementation of 4D-var, Using an Incremental Approach [J]. Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 1994, 120: 1367- 1387.
- [3] Ralf G, Thomas K. Recipes for Adjoint Code Construction [J]. ACM Trans On Math. Software, 1998, 24(4): 437- 474.
- [4] Rostaing N, Dalmas S, Galligo A. Automatic Differentiation in Odyssee [J]. Tellus, 1993, 45A: 558- 565.
- [5] Sadourney R. The Dynamics of Finite Difference Models of Shallow-water Equations [J]. Atmos. Sciences, 1975, 32: 680- 689.
- [6] Song J Q, Sun A X, Li X M. Parallel Computation of Shallow-water Model on Workstations Cluster [J]. Wuhan University Journal of Natural Sciences, 1996, 1(3): 522- 525.
- [7] Hovland P. Automatic Differentiation of Parallel Programs [D]. PhD. Thesis: University of Illinois at Urbana-champaign, 1997.