Масштабируемая массивно-параллельная реализация схемы переноса примесей MPDATA на распределенных GPU/SMP системах

Левченко Олег – Петров Артем – Микушин Дмитрий

Геофизический Центр РАН – СибНИГМИ РАН – ИВМ РАН

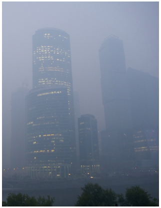
октябрь, 2010

UCAR Vapor

План

- Физическая задача
- Выбор численного метода
- Численная схема MPDATA
- Проект параллельной реализации MPDATA для гибридных суперкомпьютеров
    - Общая схема вычислений
    - Архитектура GPU GT200
    - Анализ реализации для GPU
    - Метод декомпозиции прямоугольной сетки
- Заключение

Перенос примеси как физическая задача

- Тип источника (точечный, распределённый)
- Тип аэрозоля (пепел, песок, соль, ...)
- Распределение размеров частиц (мониторинг концентрации опасной мелкодисперсной пыли)
- Динамика: эмиссия (+ сальтация), перенос (+ химические процессы), осаждение

Модели и численные схемы

- Физические уравнения модели прогноза погоды WRF v.3 [1]
- Численные схемы адвекции
  - Ориентированы на пассивные примеси
  - Сохранение массы
  - Эйлеровы модели
    - Ограничения на временной шаг
  - Полу-Лагранжевые модели:
    - Большие временные шаги без потери стабильности
    - Порядок точности
    - Сохранение массы/положительно-определенность
    - Overshooting/undershooting

$$\partial_t U + (\nabla \cdot \mathbf{V} u) - \partial_x(p \partial_\eta \phi) + \partial_\eta(p \partial_x \phi) = F_U \tag{2.3}$$

$$\partial_t V + (\nabla \cdot \mathbf{V} v) - \partial_y(p \partial_\eta \phi) + \partial_\eta(p \partial_y \phi) = F_V \tag{2.4}$$

$$\partial_t W + (\nabla \cdot \mathbf{V} w) - g(\partial_\eta p - \mu) = F_W \tag{2.5}$$

$$\partial_t \Theta + (\nabla \cdot \mathbf{V} \theta) = F_\Theta \tag{2.6}$$

$$\partial_t \mu + (\nabla \cdot \mathbf{V}) = 0 \tag{2.7}$$

$$\partial_t \phi + \mu^{-1}[(\mathbf{V} \cdot \nabla \phi) - gW] = 0 \tag{2.8}$$

Характерные особенности MPDATA

Специально разработана под метеорологические нужды:

- Положительная определенность
- Сохранение массы
- Вычислительная простота, сравнимая с донорной схемой

Расширения MPDATA

Численная модель вычислений MPDATA хорошо теоретически проработана и включает следующие расширения [4]:

- Возможность увеличить пространственную точность до третьего порядка, временную точность до пятого
- Возможность эмпирической подстройки для увеличения точности без увеличения вычислительной сложности
- Физическая диффузия в составе адвективного потока
- Траспорт скалярного поля с переменным знаком
- Моделирование дивергентных полей

Почему MPDATA?

- Численная модель вычислений MPDATA потенциально может быть оптимизирована под CUDA:
  - Соотношение доступов в память к вычислениям
  - Явная модель вычислений
- Является частью численных гидродинамических моделей погоды EULAG и NH3D

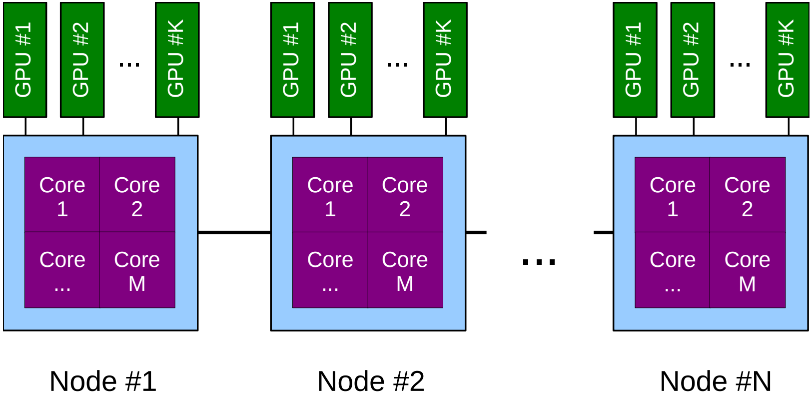
Одномерный случай - формулировка адвекции[3]

1. $\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial(\Psi\cdot\upsilon)}{\partial x} = 0$, где Ψ - концентрация, υ - скорость ветра
2. $\Psi_i^{n+1} = \Psi_i^n + [\overbrace{F(\Psi_{i-1}^n, \Psi_i^n, U_{i-1/2}^{n+1/2})}^{\text{входной поток}} - \overbrace{F(\Psi_i^n, \Psi_{i+1}^n, U_{i+1/2}^{n+1/2})}^{\text{выходной поток}}]$
3. $F(\Psi_L, \Psi_R, U) = 0.5\cdot(U + |U|)\cdot\Psi_L + 0.5\cdot(U - |U|)\cdot\Psi_R$, где $U = \upsilon\cdot\frac{\Delta t}{\Delta x}$
4. $\max\limits_{i,n}|\upsilon_{i\pm1/2}|\cdot\frac{\Delta t}{\Delta x} \leqslant 1$ - условие стабильности схемы
5. $O(\Delta x)$ - недостаточно для практических применений

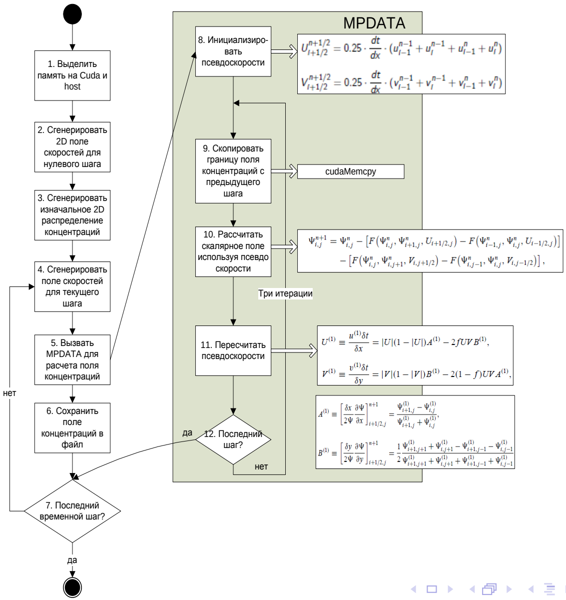
Одномерный случай - MPDATA[3]

1. $\frac{\partial \Psi_i^n}{\partial t} + \frac{\partial(\Psi_i^n \cdot \upsilon)}{\partial x} = \frac{\partial[\frac{1}{2}\cdot(|\upsilon|\cdot\Delta x - \upsilon^2\cdot\Delta t)\cdot\frac{\partial\Psi_i^n}{\partial x}]}{\partial x}$ вместо $\frac{\partial \Psi_i^n}{\partial t} + \frac{\partial(\Psi_i^n \cdot \upsilon)}{\partial x} = 0$
2. $\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial(\Psi \cdot \upsilon)}{\partial x} = \frac{\partial(K\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x})}{\partial x}$ где $K = \frac{1}{2}\cdot(|\upsilon|\cdot\Delta x - \Delta t\cdot\upsilon^2)$ - коэффициент диффузии
3. $\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial(K\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x})}{\partial x} = 0$ - "скрытое"уравнение адвекции
4. $\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial(\Psi \cdot \upsilon_{diff})}{\partial x} = 0$ где $\upsilon_{diff} = -\frac{K}{\Psi}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x}$
5. $u_{antidiff} = -u_{diff}$ - "проигрыш"диффузии назад во времени
6. $\Psi_i^* = \Psi_i^n + [F(\Psi_{i-1}^n, \Psi_i^n, U_{i-1/2}^{n+1/2}) - F(\Psi_i^n, \Psi_{i+1}^n, U_{i+1/2}^{n+1/2})]$
7. $\Psi_i^{n+1} = \Psi_i^* + [F(\Psi_{i-1}^*, \Psi_i^*, \upsilon_{i-1/2}^{antidiff}) - F(\Psi_i^*, \Psi_{i+1}^*, \upsilon_{i+1/2}^{antidiff})]$ где $\upsilon_{i+1/2}^{antidiff} = \frac{(|\upsilon_{i+1/2}|\cdot\Delta x - \Delta t\cdot\upsilon_{i+1/2}^2)\cdot(\Psi_{i+1}^* - \Psi_i^*)}{(\Psi_i^* + \Psi_{i+1}^* + \epsilon)\cdot\Delta x}$
8. $O(\Delta x^2)$ - достаточно для практических применений

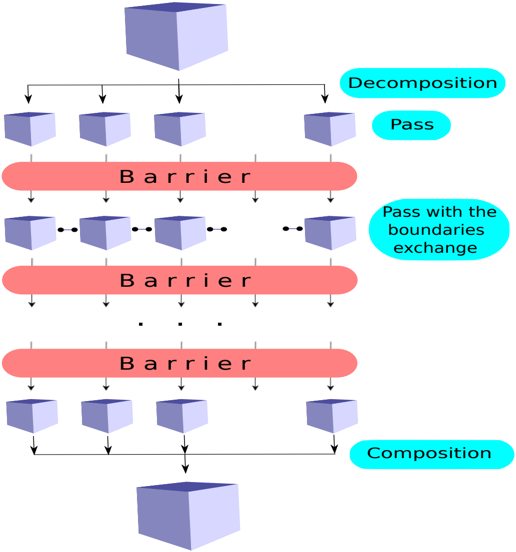
Целевая гибридная вычислительная система



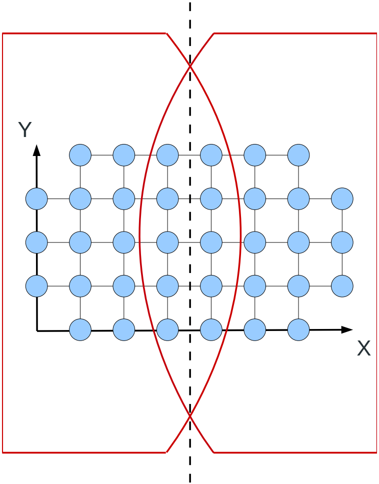
Структура GPU-CPU программного комплекса[2]



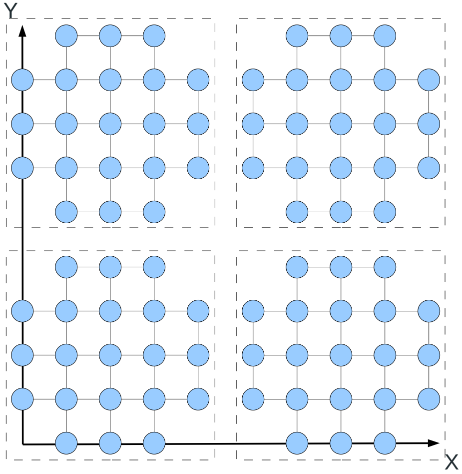
Организация многопоточности



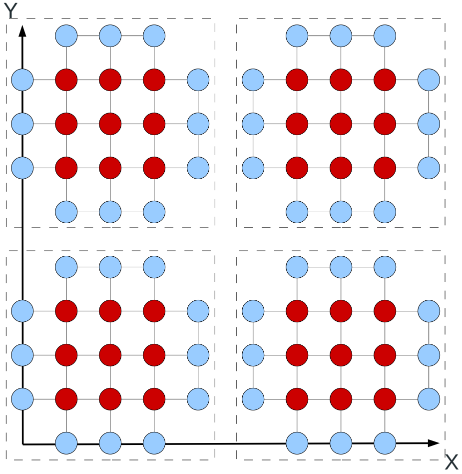
Дублирование границ при декомпозиции



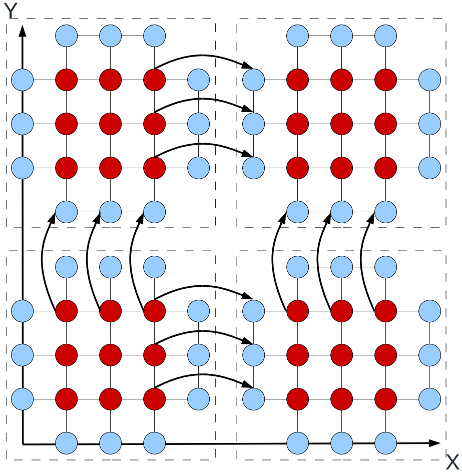
Данные в распределённой памяти



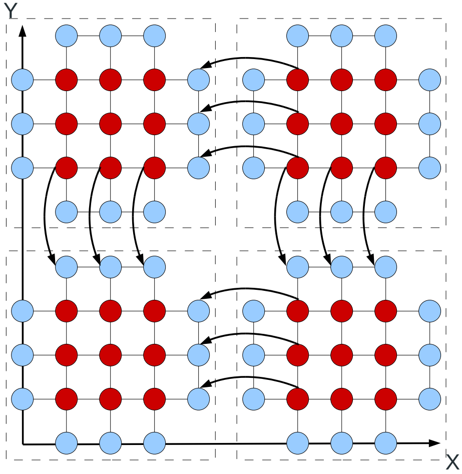
Параллельный расчёт внутренних узлов



Синхронизация граничных узлов



Синхронизация граничных узлов



Библиотека «multigrid»

- Предназначена для осуществления полного цикла декомпозиции
- Модульная структура: ядро и вспомогательные компоненты (тайминг, мультигрид и генераторы)
- Предметно не зависима
- Реализована двухуровневая декомпозиция

Двухуровневая декомпозиция

- Внутри каждой подобласти происходит дополнительное выделение локальных подобластей
- Между связанными областями устанавливаются ссылки
- Все ссылки ориентированы по таблице с фиксированными индексами
- Обмен данными происходит только между локальными граничными подобластями

Заключение

- Изучена предметная область численных решений уравнения адвекции
- Протестирована последовательная версия алгоритма MPDATA
- Начата разработка CUDA реализации алгоритма MPDATA
- Реализована проблемно-независимая распределенная среда обмена границами

A Description of the Advanced Research WRF Version 3.
http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v3.pdf.

D. N. Mikushin.
Численное моделирование мезомасштабного переноса примеси над гидрологически неоднородной поверхностью.

P. K. Smolarkiewicz.
A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion.

P. K. Smolarkiewicz and L. G. Margolin.
Mpdata: A finite-difference solver for geophysical flows.