

# 基于并行可扩展科学计算工具集求解 GRAPES 全球非静力模式亥姆霍兹问题<sup>\* 1</sup>

张理论<sup>1</sup> 宋君强<sup>1</sup> 赵文涛<sup>1</sup> 胡江林<sup>2</sup>

ZHANG Lilun<sup>1</sup> SONG Junqiang<sup>1</sup> ZHAO Wentao<sup>1</sup> HU Jianglin<sup>2</sup>

1. 国防科学技术大学计算机学院软件研究所, 长沙, 410073

2. 中国气象局数值预报中心, 北京, 100081

1. *School of Computer Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*

2. *Center of Numerical Weather Forecast, China Meteorological Administration, Beijing 100081, China*

2009-01-17 收稿, 2010-12-16 改回.

**Zhang Lilun, Song Junqiang, Zhao Wentao, Hu Jianglin. 2011. Solving Helmholtz equations of the GRAPES global nonhydrostatic model based on the PETSc. *Acta Meteorologica Sinica*, 69(3):432-439**

**Abstract** 3D Helmholtz equations are the key bottleneck of the dynamic core of nonhydrostatic atmosphere model. These equations are complicated to solve with poor-conditioned linear systems. Common preconditioners with Krylov iterative methods always converge slowly. With the increase of time and space resolution of the global nonhydrostatic model, solving Helmholtz equations are more stubborn in both precision and efficiency. Under high resolution, both number of iteration step and complexity per step aggravate sharply, some traditional preconditioned Krylov methods even do not converge. It is important to find a method for solving Helmholtz equations with both good convergence characteristic and high parallel scalability. To investigate efficient solvers, a common platform for comparing algorithm should be constructed beforehand. On the Itanium2 cluster, the PETSc and the hypre are seamlessly linked together as a parallel problem solving environment of the GRAPES global model. The LU preconditioner used in the GRAPES, the algebraic multigrid (AMG) preconditioner, the parallel LU preconditioner (EUCLID) and Schwarz domain decomposition preconditioners are compared. This research shows that the combination of the PETSc and the hypre is effective for computing optimization of Helmholtz equations. Especially the case of AMG (Boomer-AMG) is the most efficient. The analyses of the parallel speedup show that the AMG preconditioned iterative is remarkably scalable, thus is fitter for massively parallel computing.

**Key words** GRAPES, Helmholtz equation, PETSc, Hypre, Preconditioner

**摘 要** 亥姆霍兹方程是非静力平衡大气模式动力内核的主要计算瓶颈之一, 其离散矩阵性态差, 采用常见预条件 Krylov 迭代往往收敛很慢。随着全球非静力平衡大气模式时空分辨率的不断提高, 亥姆霍兹方程求解面临求解精度和计算时间的双重困难。在高分辨率情况下, 迭代计算步数和计算量剧增, 而且很多传统的预条件迭代求解方法不收敛, 迫切需要研究收敛性和并行可扩展性兼备的预条件迭代方法。为此, 在安腾机群上建立了基于并行可扩展科学计算工具集 (PETSc) 的 GRAPES 全球非静力平衡模式亥姆霍兹问题并行解法器对比研究平台, 结合高性能预条件库 (hypre), 完成了对 GRAPES 在用解法器、代数多重网格、并行不完全 LU 分解 (EUCLID) 及加性 Schwarz 区域分解等一系列克雷洛夫预条件迭代的分析对比。结果显示 PETSc 结合高性能预条件库的并行方案是解决 GRAPES 模式三维亥姆霍兹方程高效并行计算的一个有效途径, 其中以代数多重网格预条件迭代的性能最突出; 并行加速比分析显示, 代数多重网格预条件迭代的并行可扩展性明显优于 GRAPES 现有解法器, 更适用于更高精度和较大规模并行计算。

\* 资助课题: 国家自然科学基金项目 (40505023)。

作者简介: 张理论, 主要从事高性能计算应用软件和并行算法等研究。E-mail: zll0434@sina.com

**关键词** GRAPES, 亥姆霍兹方程, 并行可扩展科学计算工具集, 高性能预条件库, 预条件

**中图法分类号** P456.7

## 1 引言

亥姆霍兹问题在科学工程计算中广泛存在。在基于隐式或半隐式离散的流体力学、气动声学、水下声学、地震波反演和电磁学等许多重要应用的数值模拟中,亥姆霍兹问题通常是计算核心,往往也是耗时瓶颈。亥姆霍兹方程的常见形式如下

$$-\nabla \cdot \nabla u(x) - k^2 u(x) = f(x) \quad (1)$$

方程(1)的形式虽简单,但却通常是不定的,即离散矩阵的特征值实部不同号,考虑到实际边界条件的选取,该矩阵一般是非对称的。方程(1)形式的二维/三维亥姆霍兹方程的最新迭代和预条件子技术主要涉及特殊的数值边界条件选取、克雷洛夫迭代、几何多重网格方法、区域分解方法、ILU 预条件子和偏移拉普拉斯预条件子,其中 ILU 预条件包括从矩阵出发构造的代数 ILU 和从微分方程算子出发构造的分析 ILU(Erlangga, 2008)。亥姆霍兹方程求解也是基于半隐时间离散的大气和海洋数值模式的重要内容,特别是近十几年来,随着计算能力和模式分辨率日益提高,全球非静力平衡大气模式逐渐成为国际气象数值模式领域的关注热点(薛纪善等, 2008),类似非静力平衡问题所涉及的三维旋转流体力学方程尚存在初值问题适定性等理论上悬而未决的问题(陈达段等, 2005),必须采用数值求解。相比式(1)而言,非静力平衡大气模式所涉及的亥姆霍兹方程形式非常复杂。国际上全球非静力平衡大气模式中三维亥姆霍兹方程具有以下共同特点:变系数、含交错导数项、不可分解、各向异性等。该问题已成为国际上全球非静力平衡数值模式普遍存在的计算瓶颈。GRAPES 全球非静力格点模式中采用了极区处理等技术(Yang, et al, 2007),同样存在亥姆霍兹方程并行求解困难、计算量大的问题。该问题的计算时间占模式总时间的比重很大,例如在 GRAPES 的全球 0.5°分辨率模式中,亥姆霍兹方程的计算时间约占整个模式积分时间的 40%以上,该比例随着分辨率的提高将进一步增加,估计全球 0.1°分辨率模式的对应比重将超过 85%,因而有必要针对 GRAPES 全球非静力模式的亥姆霍兹问题研究高效的并行解法器。

近年来,国际上对非静力平衡全球模式亥姆霍兹方程的高效并行解法器报道较少。基于对存储和舍入误差的考虑,目前研究集中于离散线性方程组的预条件克雷洛夫迭代,其关键是寻求合适的预条件子。Chen 等(2001)讨论了亥姆霍兹方程的几何多重网格迭代求解,采用了著名的 Mudpack 多重网格程序包,针对二维简化后各向同性的情形初步验证了几何多重网格的可行性,但未讨论方法的并行效率以及三维情形的实际效果。事实上,大量研究报告显示单纯采用传统几何多重网格很难处理高维各向异性问题,特别是合适的粗细网格难以人工选择,而且几何多重网格涉及到大量修改诸如 Fortran 的软件代码,这在软件工程实现上也是一个挑战。Skamarock(1997)采用交替方向隐式(ADI)预条件广义共轭剩余(GCR)方法求解非静力平衡模式的亥姆霍兹问题,ADI 预条件通过逐方向求解简化后的方程实现,该预条件子虽可将 GCR 迭代次数显著降低,但却引入了大量细粒度通信,严重降低了算法的并行可扩展性,很难实现高效大规模并行。Thmoas 等(2003)在加拿大 MC2 串行非静力平衡模式中采用 FFT 谱预条件子,构造了复杂亥姆霍兹问题的一个近似方程,即去掉交错导数项和对系数做区域平均处理,得到常系数亥姆霍兹问题,在此基础上实现了谱预条件 GCR 迭代求解。Smolarkiewicz 等(2004)在小规模并行计算环境下基于重启 GCR 方法,比较了谱预条件子和线性松弛预条件子在求解亥姆霍兹问题中的优劣,发现对于非静力、滞弹性、变形网格的 EULAG 模式,采用谱预条件子的计算效率往往还不如简单的线性松弛预条件子,甚至出现了个别算例采用线性松弛预条件子能够收敛,而谱预条件子不能收敛的情况。刘宇等(2007)针对 GRAPES 有限区域模式亥姆霍兹方程 19 对角矩阵的数值特点,通过先构造 7 对角近似矩阵,尔后对近似矩阵构造不完全 LU 分解预条件,结合 GCR 迭代构成了目前 GRAPES 模式的在用解法器(简称 LC 解法器)。一般认为,多重网格具有最佳理论计算的复杂性,求解问题规模与迭代次数近乎无关,代数多重网格具有类似的优势(徐小文等, 2007)。代数多重网格在很多领域的数值模拟中得到应用,例

如电磁、心脏生物医学数值模拟、电路模拟和陀螺动力学湍流模拟等(Plank, et al, 2007; Robert, et al, 2007; Adams, et al, 2007)。GRAPES 非静力平衡全球大气模式的球面三维网格选取复杂,特别是极点问题带来额外的复杂度,考虑到代数多重网格只依赖系数矩阵,因而采用代数多重网格方法有望避开球面粗细网格的人为选择问题。Hypre 库是国际上广受关注的求解大型方程的并行先进预条件库,其中包含代数多重网格实现。考虑到预条件子选择的广度和软件实现的复杂性,本文尝试将 PETSc 作为大气数值模式的高层解法器库和并行编程环境,利用 PETSc 自身的并行计算性能及其对 hypre 的兼容性,对一系列预条件迭代方法进行测试对比。

## 2 GRAPES 模式三维亥姆霍兹方程

### 2.1 时间离散和方程连续形式

全球 GRAPES 模式采用非静力、全可压方程组,水平方向上采用经纬度的球面坐标,垂直方向采用高度地形追随坐标,空间差分水平方向上采用 Arakawa 跳点格式,垂直方向采用 Charney-Philips 跳点格式,积分方案使用两时间层的半隐式半拉格朗日时间差分方案,三维亥姆霍兹方程为关于气压扰动的椭圆方程。GRAPES 模式通过引入“参考廓线”(类似平均状态)对旋转球坐标系下的原始方程组进行线性化处理,采用两时间层的半隐式半拉格朗日时间差分方案(薛纪善等, 2008; 胡江林, 2007)。在不考虑物理过程的情况下,由表征 GRAPES 绝热过程的方程组可推得预报变量的隐式时间积分方程组

$$(\pi')^{n+1} = \xi_{\pi 1} u^{n+1} + \xi_{\pi 2} v^{n+1} + \xi_{\pi 3} \hat{w}^{n+1} + \xi_{\pi D} (D_3)_z^{n+1} + \xi_{\pi 0} \quad (2)$$

$$u^{n+1} = \left[ \xi_{u 1} \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \xi_{u 2} \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \xi_{u 3} \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \right] \cdot (\pi')^{n+1} + \xi_{u 0} \quad (3)$$

$$v^{n+1} = \left[ \xi_{v 1} \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \xi_{v 2} \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \xi_{v 3} \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \right] \cdot (\pi')^{n+1} + \xi_{v 0} \quad (4)$$

$$\hat{w}^{n+1} = \left[ \xi_{w 1} \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \xi_{w 2} \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \xi_{w 3} \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \right] \cdot (\pi')^{n+1} + \xi_{w 0} \quad (5)$$

$$(\theta')^{n+1} = \xi_{\theta 3} \frac{\partial}{\partial \hat{z}} (\pi')^{n+1} + \xi_{\theta 0} \quad (6)$$

$$q_i^{n+1} = \xi_{q 0} \quad (7)$$

其中,常系数包括  $\xi_{\pi 1}$ 、 $\xi_{\pi 2}$ 、 $\xi_{\pi 3}$ 、 $\xi_{\pi D}$ 、 $\xi_{u 1}$ 、 $\xi_{u 2}$ 、 $\xi_{u 3}$ 、 $\xi_{v 1}$ 、 $\xi_{v 2}$ 、

$\xi_{v 3}$ 、 $\xi_{w 1}$ 、 $\xi_{w 2}$ 、 $\xi_{w 3}$ 、 $\xi_{\theta 3}$ , 随时间变化的计算项包括  $\xi_{u 0}$ 、 $\xi_{v 0}$ 、 $\xi_{w 0}$ 、 $\xi_{\theta 0}$ 、 $\xi_{\pi 0}$ 。

### 2.2 边界条件和空间差分离散

解方程组(2)–(7)的上下边界条件是  $\hat{w} = 0$ , 物理意义是模式大气不能穿越地表和大气模式顶,在数学上表示为  $\hat{z} = 0$  和  $\hat{z} = Z_T$  处有

$$\left[ \xi_{w 1} \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \xi_{w 2} \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \xi_{w 3} \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \right] (\pi')^{n+1} + \xi_{w 0} = 0$$

全球 GRAPES 模式东西方向为周期边界条件。压力变量  $\pi$ 、 $u$ 、 $v$  定义在半层上,为方便应用上下边界条件,还向模式底层之下和模式顶层之上各延伸了半层,将压力变量  $\pi$  定义扩展在这两个延伸的半层上。地形高度  $Z_S$  定义在  $\pi$  点上,而地形坡度  $\phi_{ex}$  和  $\phi_{sy}$  分别定义在  $u$ 、 $v$  点上。南北极区的奇点处理将水平风速“ $v$ ”分量置于两个极地点处, $v$  的预报采用诊断的方法,即用最近极地点一圈来确定极点的向量风(Yang, et al, 2007)。模式方程(2)–(7)中的所有系数都定义在其相应的预报变量格点上。将方程式(3)–(6)代入式(2)即得到关于  $\pi'$  的亥姆霍兹方程,求解出方程后利用式(3)–(7)回代就可实现半隐式半拉格朗日的时间积分。记差分算符和平均算符分别为:

$$A_\lambda = \frac{A_{i+1/2} - A_{i-1/2}}{\delta x}$$

$$\bar{A}^\lambda = \frac{A_{i+1/2} + A_{i-1/2}}{2}$$

则可得到差分形式的关于  $\pi'$  的亥姆霍兹方程(略去变量撇号):

$$\begin{aligned} \pi = & \xi_{\pi 1} (\bar{\xi}_{u 1} \pi_\lambda + \xi_{u 2} (\bar{\pi}^{\varphi \lambda})_\varphi + \xi_{u 3} (\bar{\pi}^{\hat{z} \lambda})_{\hat{z}} + \xi_{u 0})_\lambda + \\ & \xi_{\pi 2} (\bar{\xi}_{v 1} (\bar{\pi}^{\lambda \varphi})_\lambda + \xi_{v 2} \pi_\varphi + \xi_{v 3} (\bar{\pi}^{\hat{z} \varphi})_{\hat{z}} + \xi_{v 0})_\varphi + \\ & \xi_{\pi 3} (\bar{\xi}_{w 1} (\bar{\pi}^{\hat{z} \lambda})_\lambda + \xi_{w 2} (\bar{\pi}^{\hat{z} \varphi})_\varphi + \xi_{w 3} \pi_{\hat{z}} + \xi_{w 0})_{\hat{z}} + \\ & \xi_{\pi D} [\mu_\varphi \cdot (\xi_{u 1} \pi_\lambda + \xi_{u 2} (\bar{\pi}^{\varphi \lambda})_\varphi + \xi_{u 3} (\bar{\pi}^{\hat{z} \lambda})_{\hat{z}} + \xi_{u 0})_\lambda + \\ & \mu_\varphi \cdot (\xi_{v 1} (\bar{\pi}^{\lambda \varphi})_\lambda + \xi_{v 2} \pi_\varphi + \xi_{v 3} (\bar{\pi}^{\hat{z} \varphi})_{\hat{z}} + \xi_{v 0})_\varphi + \\ & \xi_{w 1} (\bar{\pi}^{\hat{z} \lambda})_\lambda + \xi_{w 2} (\bar{\pi}^{\hat{z} \varphi})_\varphi + \xi_{w 3} \pi_{\hat{z}} + \xi_{w 0})_{\hat{z}}] + A_\pi \quad (8) \end{aligned}$$

将式(8)展开得到关于气压变量  $\pi'$  代数方程组,该方程组的大小是气压变量  $\pi'$  的格点个数,现阶段 GRAPES 模式的三维亥姆霍兹方程矩阵采用 19 点格式,即每个格点的气压变量  $\pi'$  与它周围的 18 个格点有关,关于气压变量  $\pi'$  的代数方程组的稀疏矩阵每行最多含 19 个不随时间变化的非零元,GRAPES

模式的三维亥姆霍兹方程展开的代数计算形式参见相关文献(薛纪善等,2008)。

### 3 PETSc 和 hypre 高性能并行软件

PETSc 和 hypre 均是受美国能源部先进计算和模拟计划(ACTS)支持的高层并行数值软件。PETSc 主要是阿肯(Argonne)国家实验室联合多家机构开发,用于并行求解偏微分方程及相关问题(Satish Balay, et al, 2006)。PETSc 是直接建立在 MPI 标准上更高层并行编程环境和数值集成库。它通过提供大量面向对象的并行代数数据结构、线性和非线性解法器和时间积分程序框架等,使用户能快速构建并行数值程序。PETSc 包含了当前主要迭代算法和一些预条件子,用户通过特有的并行分布数组数据结构(DA)实现并行数据分布,其并行数据分布约定对矩阵进行按行剖分。图 1 给出了

PETSc 的软件用户视图,PETSc 自身提供了一整套偏微分方程数值求解解决方案,支持从时间积分、非线性解法器到线性方程求解等若干层次的高层编程,用户只需遵循 PETSc 的数据结构和并行剖分约定,通过主程序和数据接口转换给出应用问题描述,调用丰富的 PETSc 功能接口即可快速建立并行数值程序。可见 PETSc 很好地体现了近年来数值计算应用领域软件工程思想:即最大限度地将应用问题物理逻辑与并行数值计算隔离开来,使得应用研究人员能够专注于应用问题的物理特性本身,而不是数值计算方法。另外,PETSc 还可以通过预留的大量外部接口,实现在用户程序中对一大批外部的数值计算软件包的直接透明调用。这些外部软件包包括:更多的预条件子迭代(hypre 等)、高效并行直接解法(SuperLU-dist 等)、网格生成和离散(Overture 等)及并行数据剖分(ParMetis 等)等。

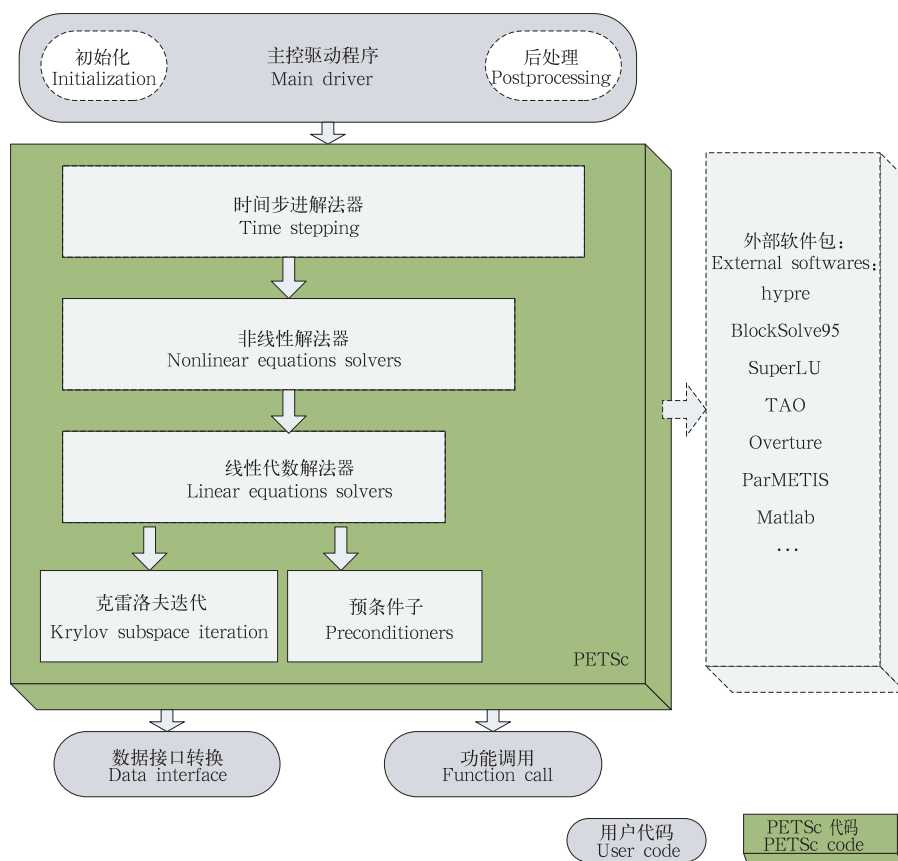


图 1 PETSc 的用户使用视图

Fig. 1 User view of the PETSc

Hypre 由劳伦斯利弗莫尔 (Lawrence Livermore) 国家实验室牵头研制, 是一个求解大型稀疏线性系统的高性能预条件库, 针对大型稀疏线性方程组, 集成了计算数学领域最新的并行预条件子。Hypre 支持“灰箱”算法, 用户的应用代码通过 Hypre 特有的线性系统概念接口访问库中的各种解法器, 该概念接口可实现对于许多应用问题的自然描述, 包括基于离散格式模版的结构化、半结构化、有限元非结构化和代数矩阵接口, 这种“概念接口”是 Hypre 的一个鲜明的软件特色 (Falgout, et al, 2006)。Hypre 提供的克雷洛夫子空间迭代法包括 GMRES、CGNR、BiCGStab 等, 这里采用了 GMRES 方法 (Saad, et al, 1986)。预条件子覆盖简单的(块)对角预条件、并行不完全 LU 分解预条件 (EUCLID)、稀疏近似逆 (Parasails) 和代数多重网格 (BoomerAMG) 等。代数多重网格 BoomerAMG 算法具备丰富的参数设置选择, 包括并行粗化方法 (CLJP 粗化、经典 RS 粗化等), 松弛策略 (比如 Gauss-Seidel 松弛、Jacobi 或加权 Jacobi 松弛) 等 (Falgout, 2006)。Parasails 是 Frobenius 范数意义下的稀疏近似逆预条件子, 若矩阵对称, 则可得到分解稀疏近似逆 (Chow, 2001)。EUCLID 是一种注重扩展性的并行不完全 LU 分解 (ILU) 预条件子 (Hysom, et al, 2001)。

## 4 数值试验与分析

### 4.1 采用的预条件迭代组合

克雷洛夫迭代方法选择 GMRES (广义最小剩余), 预条件子采用 5 种。

(1) JACOBI: 块雅克比预条件;

(2) EUCLID: 默认采用 ILU(1) 不完全 LU 分解预条件, 来自 Hypre 实现;

(3) PARA: Parasails (PARA) 是稀疏逼近逆预条件子的一个重要实现, 采用预先设定的稀疏矩阵非零元形式, 通过阈值、矩阵方幂次数和后滤波等参数调节预条件子的质量;

(4) AMG: 代数多重网格方法 (BoomerAMG 实现), 默认选择 V 循环格式, 松弛格式采用 Jacobi/Gauss-Seidel 混合, 内点用 Gauss-Seidel, 拟边界点用 Jacobi, 最粗层用高斯消去法; 强连通阈值采用 0.5, 最大网格层数 20;

(5) SCHWARZ: 单层重叠性 Schwarz 预条

件, 其软件实现来自 PETSc。

采用 GRAPES 模式在用的不完全 LU 分解预条件 gcr 迭代作为对照, 称之为 LC 解法器 (刘宇, 曹建文, 2008)。迭代判敛准则取迭代残差 L2 范数不超过  $10^{-15}$ , 测试 GRAPES 模式不含辐射和陆面过程的单个积分中间步的墙钟时间, 不统计 I/O 时间。

### 4.2 数值试验

测试平台主要采用双 CPU 安腾 2 机群, 共 7 个节点, 单节点 4 个 CPU, 共 28 个 CPU, 主频 1.6 GHz, 节点内存 4 GB, 千兆以太网。操作系统版本 Redhat AS4 2.6.18, Intel 编译器版本 9.01, 并行软件包括 MPICH-2.097, PETSc-2.3.2, hypre-2.0 等。

#### 4.2.1 算例 1

全球平衡流理想场试验: 网格规模  $144 \times 72 \times 33$ , 自变量个数为 342144。表 1 给出了算例 1 单步时间积分的预条件并行迭代墙钟时间, 并行规模涉及单 CPU 到 28 个 CPU 并行。

表 1 算例 1 预条件单步迭代并行计算的墙钟时间 (单位: s)

Table 1 Walltime of the parallel preconditioned iteration for the ideal dataset per step (unit: s)

| 预条件     | 并行规模 (CPU) |       |       |       |      |
|---------|------------|-------|-------|-------|------|
|         | 1          | 4     | 7     | 14    | 28   |
| AMG     | 18.81      | 5.05  | 2.62  | 1.35  | 0.87 |
| LC      | 22.02      | 8.75  | 4.28  | 3.88  | 3.94 |
| EUCLID  | 57.84      | 20.79 | 9.88  | 6.45  | 3.30 |
| PARA    | 108.91     | 42.24 | 17.53 | 9.72  | 4.87 |
| SCHWARZ | 45.60      | 19.47 | 7.58  | 4.39  | 2.62 |
| JACOBI  | 181.63     | 69.20 | 28.07 | 16.82 | 9.22 |

图 2 给出了算例 1 不同预条件迭代的性能。其中图 2a 给出多种预条件迭代相对 LC 解法器而言的墙钟时间加速, 旨在考察测试平台最大并行规模 (28 个处理器并行) 下预条件子之间的性能差异, 考虑到 LC 解法器为 GRAPES 全球模式的在用方法, 以 LC 预条件子对应墙钟时间为基数, 得到各个预条件子相对 LC 预条件子的加速倍数  $t_{LC}/t_*$ ; 图 2b 给出了各个预条件迭代自身的并行计算加速比。

#### 4.2.2 算例 2

全球真实数据场试验: 采用全物理过程和实际观测数据, 网格规模  $720 \times 361 \times 33$ , 自变量个数为 8577360, 该分辨率接近于目前业务模式的网格规模。表 2 给出 7、14 和 28 个 CPU 并行规模的迭代墙钟时间。

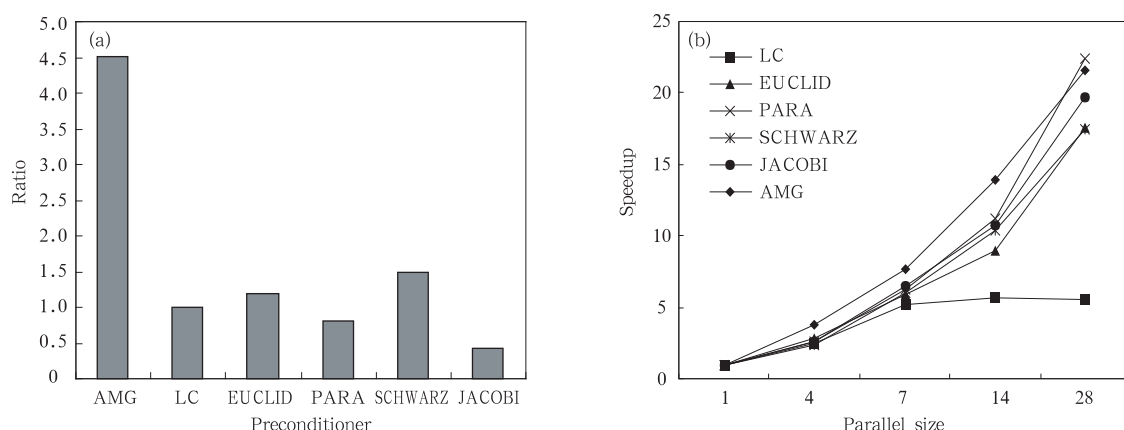


图2 算例1不同预条件迭代的性能

(a. 各预条件迭代相对 LC 解法器的加速倍数; b. 预条件迭代并行加速比曲线)

Fig. 2 Performance of the different preconditioners for the ideal dataset

(a. ratio vs. preconditioner; b. parallel speedup curve of each preconditioner)

表2 算例2预条件单步迭代并行计算

墙钟时间(单位:s)

Table 2 Walltime of the parallel preconditioned iteration for the real dataset per step (unit:s)

| 预条件     | 并行规模(CPU) |         |        |
|---------|-----------|---------|--------|
|         | 7         | 14      | 28     |
| AMG     | 325.37    | 167.15  | 100.82 |
| LC      | 175.93    | 162.23  | 160.60 |
| EUCLID  | 1376.30   | 1018.67 | 449.15 |
| SCHWARZ | 497.34    | 281.20  | 263.92 |

图3给出了算例2的相对并行加速比(相对并行规模为7个CPU时),由于内存受限,并行计算最小规模为7个CPU任务并行。图4为几种主要预条件迭代的下降曲线。

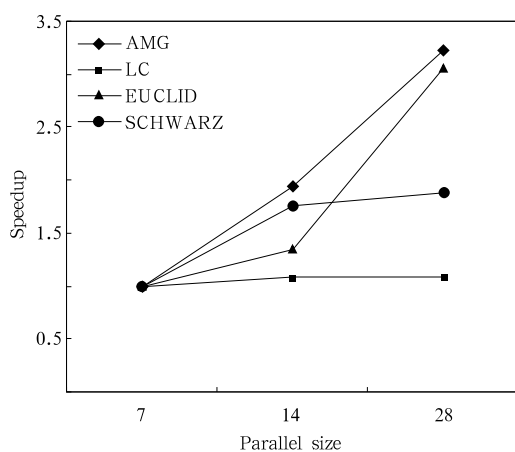


图3 算例2的相对并行加速比

Fig. 3 Relative speedups for the real dataset

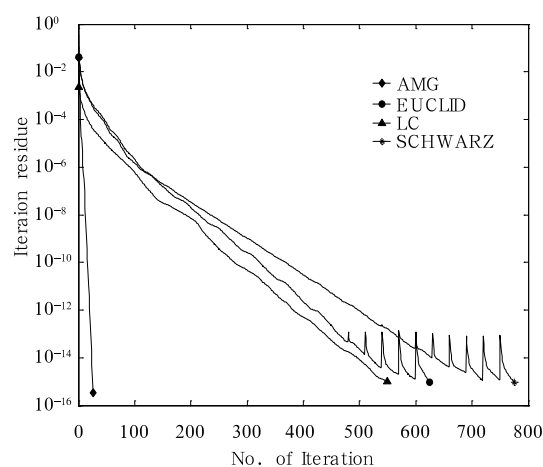


图4 算例2预条件迭代的残差下降曲线

Fig. 4 Residual curves of the preconditioned iteration for the real test dataset

### 4.3 结果分析和进一步讨论

算例1:表1显示在并行规模14个CPU以下,各个解法器墙钟时间按由小到大的顺序均为 AMG - LC - SCHWARZ - EUCLID - PARA - JACOBI,而在28任务并行时,顺序为 AMG - SCHWARZ - EUCLID - LC - PARA - JACOBI, LC解法器性能随着并行规模的增大没有明显改善。图2a中给出了28任务并行时各个预条件迭代相对LC解法器的性能加速倍数,其中AMG预条件迭代的加速倍数达到4.5, SCHWARZ预条件迭代的加速倍数为1.5。图2b的加速比曲线展示了各解法器的并行可扩展性能,其中LC可扩展性最

差,在并行规模超过 7 时加速比曲线非常平缓,并行加速效果差;AMG 可扩展性最好,加速比曲线接近线性。图 5 中 AMG 的迭代下降曲线非常陡,只需  $O(10)$  量级的迭代收敛次数(11 次),而 LC、SCHWARZ 和 EUCLID 的下降曲线比较平缓,需  $O(100)$  量级的迭代收敛次数,当残差小于  $10^{-8}$  时三者的下降轨迹比较接近。

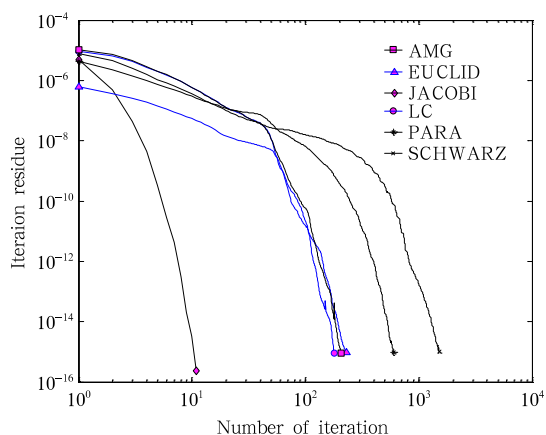


图 5 算例 1 预条件迭代的残差下降曲线

Fig. 5 Residual curves of the preconditioned iteration for the ideal dataset

算例 2:表 2 显示 LC 解法器在 7 和 14 个 CPU 并行规模具备时间优势,在 28 个 CPU 并行时 AMG 预条件迭代最快。图 3 显示 LC 解法器的相对并行加速很差,AMG 预条件迭代相对并行加速接近线性,而 SCHWARZ 和 EUCLID 预条件迭代则互有交替。图 4 中 AMG 下降曲线非常陡,收敛迭代步数为  $O(10)$  量级(26 次),而 LC、SCHWARZ 和 EUCLID 下降曲线相对平缓,迭代次数在 500—800;LC 轨迹曲线是单调下降的,而 SCHWARZ 和 EUCLID 的轨迹曲线中出现了回折。

讨论:测试机群平台采用千兆以太网,相对较高端的光纤互联而言,该平台存在通信瓶颈,这凸现放大了解法器的并行可扩展性。针对两个算例,LC 解法器在 7、14 和 28 个 CPU 并行的并行加速不明显,甚至出现无加速情形,而其他预条件特别是 AMG 预条件迭代则接近线性加速,且 AMG 迭代的墙钟时间在 28 个 CPU 并行规模下明显低于 LC 解法器的墙钟时间。由此可见,所有测试的解法器中,LC 解法器的并行可扩展性最差,AMG 预条件迭代的可扩展性最好。AMG 预条件迭代在具有通信瓶颈的机群上尚能得到拟线性加速,因而可预测 AMG 预条件迭代在

高端并行机可得到更好的性能。为进一步说明 AMG 预条件迭代的并行可扩展性,表 3 给出了算例 2 在基于 Infiniband 互联的至强集群平台(单计算结点含两颗主频 3.0 GHz 的至强 E5450 四核处理器,共享内存 32 GB,迭代残差 L2 范数不超过  $10^{-12}$ )上的 LC 和 AMG 预条件迭代时间结果,图 6 给出两种预条件迭代的相对加速比曲线。从中不难发现 AMG 预条件迭代在高端的 Infiniband 互联平台上同样具有较好的并行可扩展性。

表 3 算例 2 单步迭代在至强集群上

墙钟时间(单位:s)

Table 3 Walltime on the Xeon cluster for the real dataset per step (unit:s)

| 预条件 | 并行规模(CPU) |       |       |       |       |       |
|-----|-----------|-------|-------|-------|-------|-------|
|     | 8         | 16    | 32    | 64    | 128   | 256   |
| AMG | 53.18     | 25.16 | 13.93 | 8.12  | 3.97  | 2.16  |
| LC  | 155.88    | 83.04 | 42.64 | 25.47 | 21.14 | 11.24 |

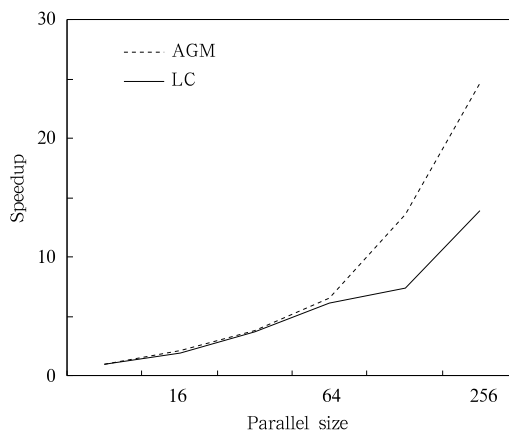


图 6 算例 2 在至强集群上的相对并行加速比

Fig. 6 Relative speedups on the Xeon cluster for the real dataset test

## 5 结论和展望

将 PETSc 数值并行计算平台用于 GRAPES 全球非静力模式,结合 HyPre 高性能预条件库,建立了统一的非静力平衡模式亥姆霍兹方程并行解法器比较研究平台。针对 GRAPES 全球理想场和实际场算例,对比分析了 GRAPES 在用 LC 解法器、代数多重网格预条件迭代、重叠性 Schwarz 区域分解预条件迭代、并行不完全 LU 分解和并行稀疏近似逆预条件迭代等求解性能。结果显示代数多重网格预条件迭代兼具墙钟时间和并行可扩展性优势,代数多重网格

预条件克雷洛夫迭代有望成为解决未来更高分辨率 GRAPES 全球非静力平衡大气模式三维亥姆霍兹方程大规模并行计算瓶颈的有效方案。

文中讨论的预条件解法器多数来自 Hypre 库,未来可考虑对更广泛并行算法库进行分析对比,例如 Trillions 和具有较好扩展性的并行稀疏直接解法器 SuperLU-dist 等;受测试平台和算例限制,未来需要对更高分辨率的全球非静力模式和更大并行计算规模进行研究;就目前的网格设计和数据剖分而言,并行负载平衡将是未来更高分辨率 GRAPES 全球模式亥姆霍兹并行计算的主要技术障碍之一,而 PETSc 软件恰恰不具备自适应负载平衡能力,这就需要在进一步优化全球模式网格设计的基础上,研究负载平衡的数据剖分并行算法;陈嘉滨等(2006)指出,在非静力平衡模式中可通过 JFNK 方法直接求解非线性方程,从而避免难解的亥姆霍兹问题。PETSc 库提供了丰富的非线性方程解法器和相关辅助功能,因而未来基于 PETSc 并行环境实现 JFNK 方案将是一个有效便捷的途径。

目前很多预条件的性能调整可以通过丰富的参数设置来实现,限于篇幅内容,文中只给出默认参数设置的性能结果;关于 PETSc 并程序设计及其与数值模式的衔接技巧,将在另文给出。PETSc 与 Mkl、Nag 等传统数学库不同,它是开源的数值并行库,也是一个高层并行应用开发和解题环境,提供了从模型建模到实现的一整套并行软件编程环境和丰富的外部高级数值软件接口。在国际上,PETSc 作为数值并行计算和应用领域的共识,已逐渐被一些大学列为从事并行应用开发的高级课程,受到许多科研机构包括工业界的重视。中国关于 PETSc 的实际并行应用较少,在气象数值模式的应用也鲜有报道。期望本文粗浅的工作能为气象数值模式的高效并行计算提供一些新的思路 and 参考。

**致谢:**本文研究工作得到了中国气象局沈学顺、伍湘君和杨学胜研究员等多位同仁的支持和帮助,谨表谢意。

## 参考文献

陈达段,何幼桦. 2004. 非静力旋转流体方程初值问题的适定性. 应用数学和力学, 25(3): 262-270

陈嘉滨,纪立人,陈长胜等. 2006. JFNK 方法概述及其在大气全隐式非静力模式中的应用方案. 大气科学, 30(5): 821-833

胡江林. 2007. 高分辨率数值模式气压梯度力算法研究[D]. 南京:南京信息工程大学, 143pp

刘宇,曹建文. 2008. 适用于 GRAPES 数值天气预报软件的 ILU 预条件子. 计算机工程与设计, 29(3): 731-734

徐小文,莫则尧. 2007. 并行代数多重网格算法可扩展性能分析. 计算物理, 24(4): 387-394

薛纪善,陈德辉. 2008. 数值预报系统 GRAPES 的科学设计和应用. 北京:科学出版社, 383pp

Adams M F, Nishimura Y. 2007. Parallel algebraic multigrid methods in gyrokinetic turbulence simulations. Commun Comput Phys, 2(5): 881-899

Chen Shuhua, Sun Wenyin. 2001. Application of the multigrid method and a flexible hybrid coordinate in a nonhydrostatic model. Mon Wea Rev, 125(4): 2660-2676

Chow Edmond. 2001. Parallel implementation and practical use of sparse approximate inverse preconditioners with a priori sparsity patterns. Int J High Perf Comput Apps, 15: 56-74

Erlangga Y A. 2008. Advances in iterative methods and preconditioners for the Helmholtz equation. Arch Comput Methods Eng, 15(1): 37-66

Falgout R D, Jones J E, Yang U M. 2006. The design and implementation of hypre, a library of parallel high performance preconditioners, chapter in numerical solution of partial differential equations on parallel computers. Springer-Verlag, 51: 267-294

Falgout R D. 2006. An introduction to algebraic multigrid, computing in science and engineering. Special issue on Multigrid Computing, 8(6): 24-33

Falgout R D, Tzanio Kolev, Panayot Vassilevski. 2007. Algebraic Multigrid Methods for Large-Scale Electromagnetic Problems. Lawrence Livermore National Laboratory, <http://science.energy.gov/~media/ascr/pdf/research/am/07-accomp-pdfs>

Hysom D, Pothén A. 2001. A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioner. SIAM J Sci Comput, 22(6): 2194-2215

Plank G, Liebmman M, Weber R, et al. 2007. Algebraic multigrid preconditioner for the cardiac Bidomain model. IEEE Trans Bio-medical Engin, 54(4): 585-596

Saad Y, Schultz M H. 1986. A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. Sci Stat Comput, 7: 856-869

Satish Balay, Kris Buschelman, et al. 2006. PETSc Users Manual-Revision 2.3.2, Argonne National Laboratory, <http://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-2/download>

Skamarock W C, Piotr K, et al. 1997. Preconditioned conjugated residual solvers for helmholtz equations in nonhydrostatic models. Mon Wea Rev, 587-599

Smolarkiewicz P K, Temperton C, Thomas S J, et al. 2004. Spectral preconditioner for nonhydrostatic atmospheric models: Extreme applications//Proc. of 2004 Seminar on Recent Developments in Numerical Methods for Atmosphere and Ocean Modeling, Reading, UK, 203-220

Thmoas Stephen J, Joshua P, et al. 2003. Spectral preconditioner for nonhydrostatic atmospheric models. Mon Wea Rev, 131(10): 2464-2478

Yang Xuesheng, Chen Jiabin, Hu Jianglin, et al. 2007. A semi-implicit semi-lagrangian global nonhydrostatic model and the polar discretization scheme. Sci China Series D: Earth Sci, 50(12): 1885-1891