中期数值天气预报中的高性能计算

金之雁

(国家气象中心,100081)

摘要 到本世纪末,集合预报、四维变分同化、Kalman 滤波、高分辨率确定性预报等技术将在中期数值业务预报中得到应用,对于高性能计算机的需求约是 CRAY C90/16 的 10—20 倍。并行向量机的发展余地已不大,大规模并行计算机依然是高性能计算机发展的主流。对称多处理结点是大规模并行计算结点机的发展方向。今后一段时间内将会主要使用 Fortran 90 和 MPI。

关键词 中期数值天气预报 高性能计算

1 中期数值预报对高性能计算的需求

数值天气预报思想的提出由来已久,早在 1904 年 Vihelm Bjerknes 就提出了可以用物理数学的方法来预测未来的天气。1922 年 L. F. Richardson 提出了著名的大计算设想。他设想建立一个"天气预报工厂",由 6 千多人坐在一个圆形的剧场里,操纵许多计算尺、计算器,他们的计算结果用许多氖灯显示,并将计算结果与前后左右的人进行交换。剧场中央竖立着一根高大的柱子,上面有一些人监视整个剧场,协调全球各部分计算进度并收集计算结果。这个设想从未得到实施,但是他第一次提出了使用消息传递的方式实现并行计算的思想。到了 1950 年 Charney 等用正压涡度方程第一次得到了数值预报的结果。

从 1979 年开始,欧洲中期天气预报中心开始进行全球数值天气预报。当时用的机器是 CRAY-1,网格点是 192×96,垂直层次为 15。目前欧洲中心确定性预报采用的全球谱模式的分辨率为 T213,垂直层次为 31 层,有 4 个预报变量,时间步长为 15 分钟,进行 10 天预报,在 CRAY C90 16 个 CPU 上,CPU 时间为 20 小时,墙钟时间为 2 小时,它的可用预报(即 500hPa 高度场距平相关系数为 0.6)已从 1980 年的 5.5 天上升到现在的 7 天。欧洲中心正在考虑到 1998 年,将全球谱模式的分辨率提高到 T500 以上。但目前还没有正式作出决定。

人们发现对于超过 5 天的确定性全球预报,在计算中加入的资料稍有变化,所预报的天气形势有时差异很大,有时却非常相似。大气非线性运动使得初始场的微小的扰动可以引起完全不同的天气发展结果。开展集合预报是解决这一问题的有效方法。集合预报的目的是:估计全球确定性预报的可信度;估计除确定性预报之外的其它可能的预报;估计某种天气发生的概率。目前欧洲中心使用奇异向量法产生初始扰动,即找出能够导致迅速发展的奇异向量,将它叠加到初始场上,每个奇异向量都可以有正负两种叠加。集合预报的原则是尽量产生多种不同的预报结果,使之能够包含实际天气的发展情况。但是预报成员是有限的,只能选择其中一部分可能性,在某些情况下实际天气的发展依然超出了所有预报成员的预报范围之外。目前欧洲中心选择 16 个最大的奇异向量进行集合预报,共有 32 个预报成员,所采用的分辨率是 T63L19,现已投入业务。1997 年欧洲中心还

要对现有的集合预报系统进行扩展，由于预报成员分辨率太低，模式地形与确定性预报所采用的模式地形相差太大，所以欧洲中心计划把预报成员的分辨率提高到 T106。成员数量也要增加到 50 个，计算量将会大大增加。

四维变分同化是中期数值天气预报的又一个发展方向，它用较低分辨率和较简单的物理过程的模式来计算高分辨初始场与观测之间的增量以减少与观测之间的差别。它有内外两重循环，分别用高低两种分辨率的模式向前向后来回积分，使观测结果与模式结果尽可能一致。目前欧洲中心用 T213 做外循环用 T63 作内循环，计算量取决于收敛的速度，即需要多少个循环。欧洲中心希望能在 1997 年投入使用。

据欧洲中心估算，四维变分同化与扩充后的集合预报所需的计算能力是 CRAY C90/16256 的 5 倍。

另一个计算量非常巨大的工作是 Kalman 滤波。欧洲中心计划在 1998 年将一个初步的 Kalman 滤波在业务上使用，所需计算能力为 CRAY C90/16256 的 10 倍，以后，欧洲中心还将把它的分辨率提高一倍，并采用更加复杂的方案，所需的计算能力是 CRAY C90/16256 的 20 倍以上。

2 高性能计算机的发展趋势

以前用巨型机才能做的事，现在用工作站就可以了。高性能计算是一个与时间密切相关的概念。它是指用价值 2 千万美元以上的计算机才能做到的事，是工作站需要 24 小时以上才能完成的事，即如果用现在的标准来衡量是浮点操作在 10^{12} 以上的工作。

高性能计算是与巨型机的发展分不开的，过去的巨型机是采用多重处理部件的 CDC6600，采用向量处理的 CRAY-1，采用共享内存并行处理的 CRAY-XMP。巨型机的更新与发展越来越快，从欧洲中心使用的巨型机的情况来看，他们在 1978 年引入峰值速度在 0.16GFlops 的 CRAY-1A 之后，过了 6 年才更新为峰值速度为 0.84GFlops 的 CRAY X-MP4，又过了 6 年才引入 CRAY YMP/8。但从此之后仅过两年就引入了峰值速度在 16GFlops 的 CRAY C90/16625。三年之后的今年又将 CRAY C90/16625 淘汰，引进了富士通的 VPP300。到 1998 年欧洲中心的计算速度将达到 500GFlops，可见现在的计算机的发展速度是越来越快，更新周期也越来越短。

今天的高性能计算机主要可分为三大类。第一类是并行向量处理机(PVP)，第二类是大规模并行处理机(MPP)，第三类是高度并行向量处理机(HPV)。并行向量处理机的特点是各 CPU 之间共享内存，采用专用的 CPU。典型代表有 CRAY Research 公司的 CRAY C90，富士通的 VP2600 和日本电器公司的 SX-3。从它们的结果结构来看，它们都采用了 ECL 技术的 CPU，时钟为 3～4ns，CPU 数量为 1～16 个，每个 CPU 的速度为 1—5GFlops，最大内存为 2GBytes，整机速度约为 20GFlops。大规模并行处理机采用分布式内存和商业化的 CPU，这种机器的典型代表有 CRAY Research 公司的 T3D、T3E，IBM 公司的 SP2 等。它们都采用 CMOS 技术的微处理机芯片的 CPU，采用 DRAM 内存，时钟为 10～20ns，处理机数量可以很大，从几百个 CPU 到几千个 CPU，但每个 CPU 的速度不像前者那样快，一般峰值计算速度在每秒几亿次浮点操作。高度并行向量处理机是前两者的混合型。它们与第一类机器一样采用专用 CPU。与第二类一样采用分布式内存。这类机器的代表有富士通的 VPP 系列，NEC 的 SX-4。它们的 CPU 采用较便宜的 CMOS 技术，内存采用较快的 SDEAM 和 SSRAM，VPP 的时钟周期为 7—8ns，每个 CPU 的峰值速度为 2GFlops，最多有 512 个 CPU。NEC 的 SX-4 由 32 个 CPU 组成一个节点，在节点内采用共享内存技术，系统最大可有 16 个节点，总共有 16×32 个 CPU。所

以这种类型的计算机的 CPU 总数为几百个而不是几千个。

芯片技术发展日新月异，CMOS 技术的线宽已经可以达到 0.2μm 以下，可以做出集成化程度更高、速度更快的芯片。CPU 芯片的超标量的体系结构有以下几个方面的发展：一是超长指令字。如果有很长的指令字就可以采用不同的处理单元来实现并行处理。二是采用执行试验性指令技术。当程序遇到判断语句时，就会分为两组指令，以往做法是全部流水线都停下来，等待判断执行完以后再继续执行相应的指令。执行试验性指令是不再等待判断，将可以的两组指令同时执行，直到做出判断为止。这样就不必停下来，提高了性能。第三种是内存延迟隐藏技术。当需要的数据不在高速缓存时，需要从相对较慢的内存中提取数据，以前的做法是将 CPU 停下来等待新的数据的调入。内存延迟隐藏技术是自动将不能执行的指令停下来，继续执行其余的指令，待数据调入后再执行停下来的指令，这样做的条件是后面的程序指令不依赖前面的结果。内存芯片技术也在不断发展。由于密度不断增加，芯片的容量不断增大。可以预期不久将会出现 256MBytes 的 DEAM 芯片和 64MBytes 的 SRAM 芯片。

大规模并行处理机的发展直接得益于以上技术的发展。在过去的几年中，RISC 芯片的处理能力每 18 个月就增加 1 倍，预计很快每个就会达到 1GFlops。在内存量方面，目前 SP2 的单 CPU 内存量可以达到 2GBytes，以后还会继续增加。互联网络的速度也在不断加快。

在大规模并行处理软件方面，目前的很多并行操作系统开始支持并行输入输出。在语言方面，Fortran90 会逐渐取代 Fortran77，因为 Fortran90 能够支持动态数组，有更多的内部函数。在消息传递库方面，现在有 MPI，以前还有 PVM，PARMACS。从现在看来，MPI 是今后发展的方向。所以今后一段时间内主要是使用 Fortran90 加上 MPI 库。高性能 Fortran 即 HPF 的发展很快，学术界对它的热情很高。但是在世界范围内大型应用课题中使用的还不多，因为它还缺少足够的灵活性。将来也许能解决这一问题。但近几年主要是使用 Fortran90 和 MPI。

并行向量处理机的 CPU 是基于 ECL 技术，造价很高，产热量大，现在的时钟周期已达到 2ns。预计发展到 1ns 以下的可能性不大，发展的余地很有限。今后它的速度会再提高一倍，但不会更多了。在内存方面，内存会更大，速度也会继续增长。这种机器由于采用共享内存方式，CPU 数量有一个上限。CPU 速度的提高也有一个上限，不可能将它的速度提高很多。这种机器性能最高是 100GFlops 左右，而且很贵。

3 欧洲中心的高性能计算

目前在高性能计算方面的工作最为有代表性的是欧洲中心。它在高性能计算方面的策略是，当在市场上出现最快的巨型机之后在尽量短的时间内尽快采用。因此他们与世界上的主要计算机厂商都有定期的交流，来了解这些厂商未来的发展方向，并参加国际上组织的计算机方面的会议。从 1984 年开始欧洲中心每 2 年举行一次并行计算在气象中的应用研讨会。今年 12 月将举行第 7 次研讨会。欧洲中心重新改写他们的业务模式，新的业务模式称为 IFS 模式。这个模式从设计的思想上就采用了消息传递方式的并行处理方式。在过去的一年半时间内又将他们的分析系统进行了并行化改造。今年 1 月三维变分同化已在 C90 上投入使用。

IFS 模式的全称是 Integrated Forecasting System。是欧洲中心新一代全球谱模式，它与原来的业务模式的最主要的区别在于该谱模式的方案就是针对采用消息传递并行处理方式而设计的。它是一个与分辨率无关的模式，它的原理与过去的谱模式是一样的。采用的并行界面是 PARMACS。该模式与法国气象局共同开发。模式是模块化的，欧洲中心

有它们的物理过程模块使之适用于中期数值预报，法国气象局有他们自己的物理模块用于气候模拟。欧洲中心将它的 IFS 模式交给世界上的主要计算机厂商，由厂商将它移植到他们的机器上去。在这个过程中，欧洲中心得到了许多反馈信息。现在这个模式既适用于向量机也适用于超标量机，非常灵活，可移植性很好。IFS 模式用 T213L31 的分辨率时在 T3D 上 1024 个处理机的性能是 C90/16 的两倍。并行效率在 99.999%以上。

欧洲中心目前正在进行的工作一是将 IFS 重新改写，全部用 Fortran90 和 MPI 库。由于目前并不是所有的厂商都支持 MPI，因此欧洲中心模式不直接使用 MPI 而使用一个自己的中间界面，再由中间界面去调用 MPI 或 PARMACS。

今年，欧洲中心向富士通公司购买了 VPP 系列计算机。VPP 系列机采用专用的向量和标量处理机。处理机采用 0.35μm 的 CMOS 技术，时钟周期为 7ns，有两个装载与存储流水线，每个时钟周期可装载存储 2×8 个字，可以产生 2×8 个计算结果。处理机间用交叉开关连接，速度为每处理机每个方向 570MB/s。欧洲中心采用一个分期分批购买计划，具体计划如表 1 所示。预计欧洲中心的 IFS 模式，分辨率为 T213L31，在 46 个 CPU 上的运行速度是 C90/16 的 5 倍，240 个 CPU 是 25 倍。届时，欧洲中心可以进行 Kalman 滤波和分辨率在 T500 以上的高分辨率模式计算。

表 1 欧洲中心 VPP 系列计算机购买计划

日 期	机 型	处理机数量	每个处理机的内存	峰值速度
1996 年 4 月	VPP300	16	2048MB	25.6GFlops/s
1996 年 6 月	VPP-C	46	2048MB	101.2GFlops/s
1998 年 4 月	VPP-C	153	512MB	336.6GFlops/s
1998 年 6 月	VPP-C	240	512MB	528GFlops/s

4. 对今后几年的发展展望

高性能计算机的发展不仅仅取决于技术本身，还与世界的政治与经济形势相联系。由于冷战的结束，美国军费削减，很多巨型计算机制造厂商或是倒闭，或被收买。而工作站制造商却日渐兴旺，这必然会对高性能计算机的发展产生巨大影响。在全世界，目前只有日本的几个公司还在生产巨型向量机。未来的高性能计算机依然是大规模并行机。它的节点将是由多个 CPU 组成的对称多处理节点。因为内存较贵，使用 4—8 个 CPU 组成的对称多处理节点能够更加有效地使用内存，在这个节点内部有向量处理器和 2 个以上的标量处理器。在用户编程方面，节点内部的并行将留给编译器完成，用户只需要写 HPF 的指导指令，在节点之间仍使用 MPI 进行通讯。