

An den Grenzen des Machbaren

SIMULATIONEN

TURBULENTER ATMOSPHÄRISCHER STÖRUNGEN BENÖTIGEN DIE WELTWEIT LEISTUNGSFÄHIGSTEN RECHNER – TECHNISCHE HERAUSFORDERUNGEN UND ANWENDUNGEN

Simulationsmodelle zur Erforschung atmosphärischer Turbulenzen sind ohne den Einsatz modernster Massivparallelrechner heute kaum denkbar. Das Institut für Meteorologie und Klimatologie hat in den letzten Jahren für diese so genannten Large-Eddy-Simulationen (LES) auf Massivparallelrechnern ein neues Modell entwickelt: PALM. Es ist weltweit eines der ersten seiner Art und dient neben der Grundlagenforschung auf lange Sicht auch der Qualitätsverbesserung von Wettervorhersagen.

Simulationsmodelle besitzen in der Meteorologie eine lange Tradition und haben mit ihren extremen Anforderungen an die Rechnerleistung seit jeher die Entwicklung von immer leistungsfähigeren Computergenerationen maßgeblich mitbestimmt.

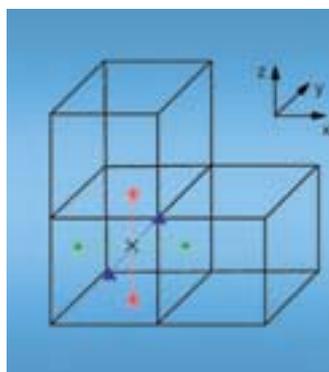
Ende der 40er Jahre des vergangenen Jahrhunderts war es das Problem der Wettervorhersage, das den berühmten ungarischen Mathematiker und Physiker John von Neumann an der Universität Princeton zur Entwicklung eines der ersten Computer überhaupt führte. Dieser Rechner gab Anlass zu einer Flut von Veröffentlichungen, die die Architektur der Computergenerationen bis zum heutigen Tage mitbestimmt haben [1].

Auch die Prinzipien der numerischen Wettervorhersage haben sich seither wenig verändert. Solche Vorhersagemodelle simulieren die zukünftige Wetterentwicklung ausgehend von einem beobachteten Anfangszustand, indem sie Prognosegleichungen für den Impuls, das heißt die Windgeschwindigkeit (die so genannten Navier-Stokes-Gleichungen), die Temperatur (den 1. Hauptsatz der Thermodynamik) und eine Reihe weiterer physikalischer Größen, wie zum Beispiel die Luftfeuchte, lösen.

Es handelt sich dabei um Differentialgleichungen, die auf analytischem Wege nicht lösbar sind. Sie werden deshalb durch Differenzen-

gleichungen approximiert, die dann auf dem Computer durch rein algebraische Operationen gelöst werden können.

Die Approximierung hat eine Diskretisierung der Lösung zur Folge, das heißt die zu prognostizierenden Größen können nicht mehr für beliebige Punkte im Raum, sondern nur für einzelne Punkte in diskretem Abstand, zum Beispiel in horizontaler Richtung alle 50 Kilometer, berechnet werden.



Diese Punkte bilden sozusagen die Kreuzungspunkte eines dreidimensionalen Gitters (s. Abbildung 1). Je kleiner der Abstand zwischen diesen Punkten – die so genannte Gitterweite – gewählt wird, um so genauer ist grundsätzlich das Ergebnis der Berechnungen, in diesem Fall also die Wettervorhersage. Der Genauigkeit werden aber durch die jeweils verfügbare Computerkapazität Grenzen gesetzt, denn bei jeder Halbierung der

Gitterweite steigt der Hauptspeicherbedarf jeweils um den Faktor 8 und die Rechenzeit sogar um den Faktor 16.

Lagen die Gitterweiten der ersten Vorhersagemodelle noch bei mehreren hundert Kilometern, so benutzt das derzeit vom Deutschen Wetterdienst eingesetzte sogenannte Lokale Modell eine horizontale Gitterweite von nur fünf Kilometern.

Damit können zwar mittlerweile auch die Einflüsse kleinräumiger orographischer Strukturen, wie zum Beispiel der Mittelgebirge, auf das Wettergeschehen berücksichtigt werden. Für die Simulation einer der wichtigsten atmosphärischen Grundeigenschaften – der Turbulenz – ist diese Gitterweite aber immer noch viel zu groß.

Durch die Reibung der Luftströmung an der Erdoberfläche sowie durch Auftriebskräfte als Folge der Erwärmung der Erdoberfläche durch die Sonneneinstrahlung werden nämlich Luftwirbel mit Durchmessern von bis zu einem Kilometer erzeugt, die aufgrund von Instabilitätsmechanismen in immer kleinere Wirbel zerfallen. Diese Turbulenz spürt man als Böigkeit der Luftströmung. Die turbulenten Wirbel sorgen unter anderem für den Transport der bodennah erwärmten Luft in größere Höhen.

Turbulenz kann in den Wettervorhersagemodellen aufgrund ihrer kleinen Ab-

messungen nicht direkt simuliert werden und muss durch empirische Ansätze, die teilweise noch erhebliche Ungenauigkeiten aufweisen, parametrisiert werden.

Aber auch ganz generell weist unser Wissen über die atmosphärische Turbulenz immer noch große Lücken auf.

Eine Möglichkeit zum Schließen dieser Wissenslücken bildet die sogenannte Grobstruktursimulation oder Large-Eddy Simulation (LES).

LES-Modelle unterscheiden sich von Wettervorhersagemodellen fast nur durch ihre Gitterweite, die je nach simuliertem Phänomen zwischen einem und hundert Metern liegt.

Damit können die jeweils größten und damit kräftigsten turbulenten Wirbel der Strömung (die »Large Eddies«) explizit berechnet werden, und nur die Effekte der relativ kleinen Wirbel mit Durchmessern kleiner als die Gitterweite müssen parametrisiert werden. Weil diese kleinen Wirbel nur wenig zum Energietransport beitragen, wirken sich selbst größere Fehler bei ihrer Parametrisierung bis auf wenige Ausnahmen kaum auf die Simulationsergebnisse aus.

Die LES-Technik wurde Anfang der 70er Jahre des vergangenen Jahrhunderts von James W. Deardorff, einem amerikanischen Meteorologen, maßgeblich entwickelt und damals erstmalig zur Untersuchung turbulenter atmosphärischer Konvektion eingesetzt [2]. Heute ist diese Technik weit verbreitet und unverzichtbares Hilfsmittel in allen den Naturwissenschaften, die sich mit turbulenten Strömungen beschäftigen [3]. Gründe dafür sind unter anderem die immer leistungsfähigeren Computer.

Simulationen der konvektiven Grenzschicht mit 40 Gitterpunkten in jeder Raumrichtung, für die Deardorff noch Wochen und Monate auf dem damals weltweit schnellsten

Rechner – einer CDC 7600 der Firma Conrol Data – benötigte, können heute auf einem PC innerhalb einer Stunde durchgeführt werden.

Dennoch gibt es im Bereich der atmosphärischen Turbulenz immer noch eine Vielzahl von Problemen, deren Untersuchung nur durch den Einsatz modernster Hochleistungsrechner möglich ist.

Die heutzutage leistungsfähigsten Rechner sind so genannte Massivparallelrechner, in denen ein Programm nicht nur von einem einzelnen Prozessor, sondern gleichzeitig von mehreren tausend Prozessorelementen (PEs) bearbeitet wird.

Will man existierende Simulationsmodelle auf solchen Rechnern effizient betreiben, müssen sie an deren spezielle Hardware angepasst – man sagt »parallelisiert« – werden.

Die Rechenoperationen werden dabei so auf die PEs verteilt, dass alle Prozessoren ungefähr gleich viel zu tun haben, denn eine ungleichmäßige Lastverteilung würde dazu führen, dass manche PEs bereits leer laufen, während andere ihre Berechnungen noch gar nicht abgeschlossen haben. Durch eine Gleichverteilung der Rechenlast kann man in einem solchen Fall die Rechenzeit eindeutig reduzieren (als Rechenzeit eines Programms bezeichnet man auf einem Parallelrechner die Zeit, bis auch der letzte Prozessor seine Berechnungen abgeschlossen hat).

Als optimaler Ansatz zur Parallelisierung von Strömungssimulationsmodellen hat sich die sogenannte Gebietszerlegung erwiesen. Dabei wird das gesamte Simulationsgebiet in gleich große Teilgebiete zerlegt (s. Abbildung 2). Jeder Prozessor berechnet dann die Lösung der Gleichungen für die Gitterpunkte genau eines Teilgebietes.

Für die Gitterpunkte am Rand der jeweiligen Teilgebiete benötigt der Prozessor aller-

dings auch Daten der jeweils benachbarten Teilgebiete, die durch spezielle Kommunikationsbefehle im Programm zwischen den entsprechenden Prozessoren ausgetauscht werden. Realisiert wird dieser Datenaustausch durch Unterprogrammaufrufe einer speziellen Kommunikationsbibliothek, dem sogenannten Message Passing Interface (MPI), das heute auf Massivparallelrechnern zum Standard gehört. [4]

Die mit der Parallelisierung eines LES-Modells verbundenen Programmänderungen sind so umfangreich, dass sie eine völlige Neucodierung des Modells notwendig machen.

In unserer Arbeitsgruppe am Institut für Meteorologie und Klimatologie wurde in den letzten Jahren ein solches parallelisiertes LES-Modell (PALM) entwickelt, das weltweit eines der ersten seiner Art ist [5, 6].

Es zeichnet sich durch hervorragende Skalierungseigenschaften aus, das heißt eine

Abbildung 1 (links) Ausschnitt aus einem dreidimensionalen Modellgitter: Variablen sind in den Mittelpunkten der einzelnen Gitterzellen aber auch auf den Mittelpunkten der Seitenflächen definiert.

Abbildung 2 Gebietszerlegung als Parallelisierungsmethode: Das gesamte Modellgebiet wird in einzelne, gleich große Quader zerlegt, für deren Gitterpunkte dann jeweils ein Prozessor die Lösung berechnet.

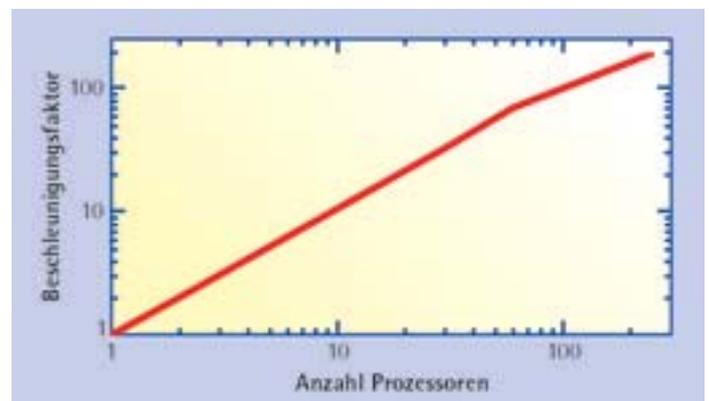
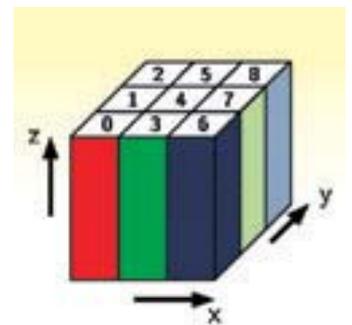


Abbildung 3 Skalierungskurve für eine typische Simulation mit PALM

Vervielfachung der Anzahl der eingesetzten Prozessoren reduziert die Rechenzeit um den entsprechenden Faktor (s. Abbildung 3).

PALM wird von uns derzeit auf Massivparallelrechnern vom Typ SGI/CRAY-T3E am Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN, 40 PEs, s. Abbildung 4), am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin (ZIB, 392 PEs)

Abbildung 4
PALM-Arbeitsgruppe des Instituts für Meteorologie und Klimatologie vor dem Massivparallelrechner SGI/CRAY-T3E des RRZN



Von links nach rechts:
Micha Gryschka, Marcus Herold,
Siegfried Raasch, Michael Schrö-
ter, Jörg Uhlenbrock, Sonja
Weinbrecht, Gerald Steinfeld

und am John von Neumann Institut für Computing (NIC, 512 PEs) in Jülich betrieben. Darüber hinaus wird es seit mehr als einem Jahr im Rahmen internationaler Kooperationen von Forschergruppen an der Yonsei-University in

desministerium für Bildung und Forschung)-Projekten. Einen Schwerpunkt bildet dabei die Frage, wie heterogene Oberflächen (wie wechselnde Flächen von Wasser, Ackerland oder Wald) die Turbulenz und damit den ver-

metrisierungen in den Wettervorhersagemodellen zu verbessern.

Eine seit langem offene Frage der Grundlagenforschung atmosphärischer Konvektion konnte durch Simulation mit PALM erstmals eindeutig beantwortet werden.

Satellitenbilder von Konvektion über den Ozeanen zeigen oft, dass die Wolken und damit die zugehörigen Aufwindgebiete in regelmäßigen hexagonalen Zellen angeordnet sind (s. Abbildung 6).

Während das Aspektverhältnis (Verhältnis von Durchmesser zu Höhe) solcher so genannter Rayleigh-Bénard-Zellen in allen Laborexperimenten etwa einen Wert von 3 annimmt, beobachtet man dagegen in der Atmosphäre typische Werte von 10 bis 30.

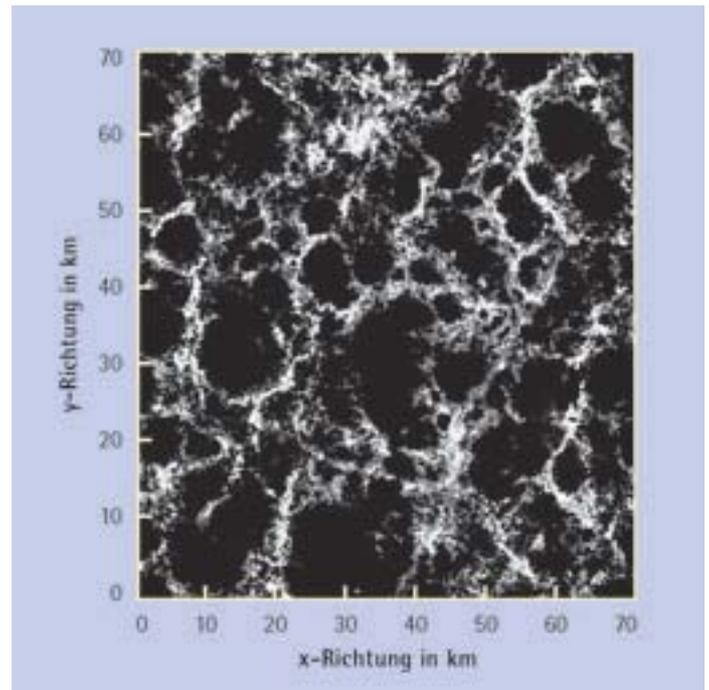
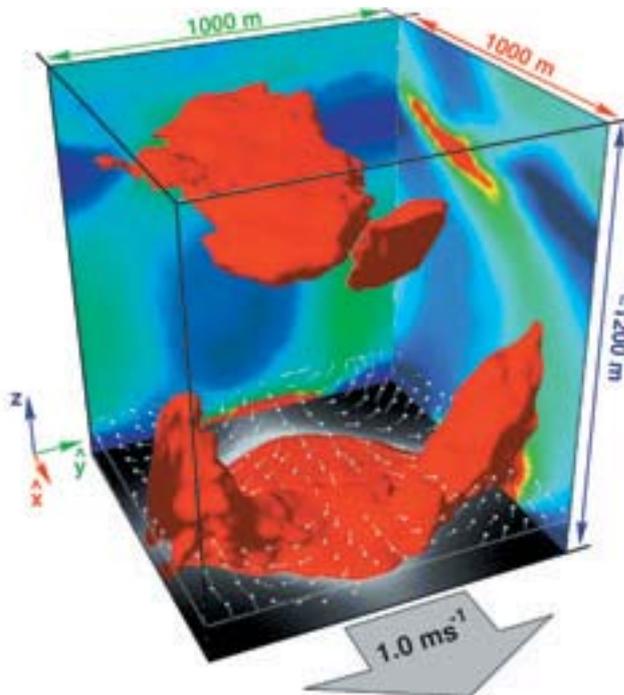


Abbildung 5 (links)
Sekundärzirkulationen verursacht durch inhomogene Oberflächen: Auf- und Abwinde sind durch Partikelbewegungen (weiß) sichtbar gemacht.

Seoul und am Tokyo Institute of Technology eingesetzt.

Unser Einsatz von PALM konzentriert sich auf die Untersuchung von Phänomenen der turbulenten atmosphärischen Grenzschicht, derzeit gefördert durch eine Reihe von DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft) und BMBF (Bun-

tikal Austausch von Wärme und Impuls beeinflussen [7].

Im Rahmen dieser Untersuchungen wurden spezielle Zirkulationsmuster entdeckt, die von der Form der Oberflächenheterogenitäten abhängen (s. Abbildung 5).

Langfristig helfen solche Untersuchungen, die entsprechenden Turbulenzpara-

Mit unseren Simulationen konnten wir zeigen, dass die Freisetzung von Kondensationswärme in den Wolken entscheidend zur Ausbildung der großen Aspektverhältnisse beiträgt.

Die Abbildung 7 zeigt ein entsprechend simuliertes Wolkenmuster.

Abbildung 6 (rechts)
Satellitenaufnahme von Konvektionszellen über dem Nordatlantik



Abbildung 7
Mit PALM simulierte Konvektionszellen

Für diese Simulation war ein Modellgebiet mit 80 Kilometern Kantenlänge in horizontaler Richtung und vier Kilometern Höhe bei gleichzeitig sehr kleiner Gitterweite von 100 Metern notwendig.

Insgesamt benötigte die Simulation einen Hauptspeicher von ungefähr 60 Gbyte und eine Rechenzeit von elf Stunden auf 256 PEs der SGI/CRAY-T3E des ZIB und demonstriert damit eindrucksvoll, welchen extremen Bedarf an Computerressourcen Large-Eddy Simulationen haben.

Dabei stellt nicht nur die reine Simulation eine Herausforderung an die Rechnerleistung dar, sondern auch die für Auswertezwecke notwendige Visualisierung der Modellergebnisse.

Eine nachträgliche Visualisierung der komplexen, dreidimensionalen und sich zeitlich ändernden Strömungsmuster aus den vom Modell berechneten Gitterpunktdaten ist selbst auf den derzeit leis-



Abbildung 8
Stereoskopische Visualisierung komplexer Strömungsmuster am Arbeitsplatz

tungsfähigsten Grafik-Workstations unmöglich, da die Gitterpunktdaten selbst für vergleichsweise kleine Modellgebiete mit $64 \times 64 \times 64$ Gitterpunkten einen Umfang von bis zu einem Terabyte haben.

Das RRZN hat deshalb eine spezielle parallelisierte Grafik-Software-Bibliothek entwickelt, die einen Teil des Visualisierungsprozesses bereits als Bestandteil der Simulation auf dem Parallelrechner selbst durchführt. Abgespeichert werden dann nur Geometriedaten für den eigentlichen Bildaufbau und zwar in einem speziellen komprimierten Format auf einem sogenannten Streaming-Server.

Von dort können dann später die Bildsequenzen mit einem speziellen Plugin für Internet-Browser abgerufen und am Arbeitsplatz-PC dreidimensional stereoskopisch betrachtet werden (s. Abbildung 8)[8]. Dazu sind allerdings ein Gigabit-Datenanschluss, eine sehr leistungsfähige Grafikkarte sowie Spe-

zialbrillen erforderlich. Diese Technik fand auf dem letztjährigen Tag der Forschung sogar prominente Interessenten (s. Abbildung 9).

Die nahe Zukunft verspricht weitere, bisher nicht realisierbare Anwendungen von PALM.

Auf dem neuen Massivparallelrechner des Höchstleistungsrechenzentrums Nord (HLRN), der voraussichtlich Mitte 2002 in zwei gleich großen Komponenten am RRZN und am ZIB in Betrieb gehen soll, werden Simulationen mit bis zu $1700 \times 1700 \times 1700$ Gitterpunkten (entsprechend 1 Terabyte Hauptspeicherbedarf) möglich sein – ein absoluter Weltrekord für Large-Eddy Simulationen.

Wir wollen diesen Rechner unter anderem dazu nutzen, die turbulente Umströmung von Gebäudekomplexen und die Ausbreitung von Abgasen in Straßenschluchten zu untersuchen.



Abbildung 9
Demonstration der vom RRZN entwickelten Visualisierungstechnik am Tag der Forschung
Von links nach rechts: Siegfried Raasch (IMUK), Bundesforschungsministerin Edelgard Bulmahn, Stephan Olbrich (RRZN)

Dr. rer.nat. Siegfried Raasch
Jahrgang 1958, ist Leiter der Arbeitsgruppe Turbulenzsimulation und Visualisierung am Institut für Meteorologie und Klimatologie

Literatur

- 1 Goldstine, H. H., 1980: The Computer from Pascal to von Neumann. Princeton University Press.
- 2 Deardorff, J. W., 1972: Numerical Investigations of Neutral and Unstable Planetary Boundary Layers. *J. Atmos. Sci.*, 29, 91–115.
- 3 Sagaut, P., 2001: Large Eddy Simulation for Incompressible Flows. Springer Verlag, 319 S.
- 4 Gropp, W., E. Lusk und A. Skjellum, 1999: Using MPI. MIT Press, Second Edition, 371 S.
- 5 Raasch, S. und M. Schröter, 2001: PALM – A Large-Eddy Simulation Model Performing on Massively Parallel Computers.
- 6 PALM-Dokumentation: <http://www.muk.uni-hannover.de/~raasch/PALM-1/intro.html>
- 7 Raasch, S. und G. Harbusch, 2001: An Analysis of Secondary Circulations and their Effects Caused by Small-Scale Surface Inhomogeneities Using Large-Eddy Simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 101, 31–59.
- 8 Olbrich, S., H. Pralle und S. Raasch, 2001: Using Streaming and Parallelization Techniques for 3D Visualization in a High-Performance Computing and Networking Environment. In: Hertzberger, B., A. Hoekstra und R. Williams: High-Performance Computing and Networking. 9th International Conference, HPCN Europe 2001, Amsterdam, The Netherlands, 25.–27.06.2001, Proceedings. Lecture Notes in Computer Science, Vol.2110, Springer-Verlag.