

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук

На правах рукописи

Гойман Гордей Сергеевич

**Масштабируемые алгоритмы решения уравнений глобальной
динамики атмосферы на редуцированной широтно-долготной
сетке**

Специальность 1.2.2 —

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Толстых Михаил Андреевич

Москва — 2022

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Горизонтальные аппроксимации на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных	17
1.1. Уравнения мелкой воды на вращающейся сфере	19
1.2. Редуцированная сетка с разнесением переменных	21
1.3. Исследование свойств пространственных дискретизаций линеаризованных уравнений мелкой воды	23
1.3.1. Исследование свойств консервативности	26
1.3.2. Стационарные вычислительные моды	31
1.3.3. Построение интерполяционных процедур	32
1.3.4. Численные эксперименты	36
1.4. Полуявная полулагранжева модель мелкой воды на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных	49
1.4.1. Пространственная дискретизация уравнений	50
1.4.2. Численные эксперименты	53
1.5. Основные результаты главы	58
Глава 2. Разработка масштабируемых алгоритмов решения эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетке	61
2.1. Модельные уравнения	64
2.2. Описание многосеточного алгоритма	67
2.3. Параллельная реализация	73
2.4. Численные эксперименты	77
2.4.1. Исследование сходимости алгоритма	77
2.4.2. Исследование масштабируемости алгоритма	81
2.5. Основные результаты главы	82
Глава 3. Повышение параллельной и вычислительной эффективности глобальной модели атмосферы ПЛАВ	84

3.1. Реализация полулагранжева алгоритма с адаптацией параллельных обменов	86
3.1.1. Численные эксперименты	88
3.2. Внедрение вычислений и параллельных обменов с использованием чисел с плавающей точкой одинарной точности . .	93
3.2.1. Внедрение одинарной точности в блок полулагранжевой адвекции	94
3.2.2. Внедрение одинарной точности в блок решения эллиптических уравнений	95
3.2.3. Численные эксперименты	96
3.3. Оптимизация работы с памятью	101
3.3.1. Управление длиной вектора в блоке физических параметризаций подсеточного масштаба	101
3.3.2. Оптимизация хранения вектора-состояния модели	104
3.4. Основные результаты главы	106
Заключение	108
Список литературы	109
Приложение А. Описание блока решения уравнений динамики модели ПЛАВ	120
A.1. Уравнения гидротермодинамики атмосферы	120
A.2. Полулагранжева аппроксимация адвективных членов уравнений . .	123
A.3. Полу неявная дискретизация по времени	125
A.4. Дискретизация по вертикали	128
A.5. Горизонтальные аппроксимации	129
A.5.1. Дискретизация операторов горизонтального градиента, дивергенции и вертикального компонента завихренности . .	130
A.5.2. Аппроксимация горизонтального оператора Лапласа	131
A.5.3. Восстановление горизонтальной скорости по завихренности и дивергенции	132
A.5.4. Решение уравнения Гельмгольца	134
A.5.5. Гипер-диффузия с бигармоническим оператором	134
A.6. Организация параллельной структуры модели ПЛАВ	137
A.6.1. Организация MPI распараллеливания	137

A.6.2. Организация OpenMP распараллеливания	139
---	-----

Введение

Актуальность темы. Прогноз погоды, вероятно, один из первых типов прогноза, который заинтересовал людей. Низкая защищенность человека от погодных аномалий и экстремальных явлений приводила к тому, что погода и климат во многом определяли вероятность выживания и уклад жизни людей, тем самым влияя на траекторию культурного, экономического и социального развития. И хотя с тех пор человек намного лучше защищен от природных катаклизмов, погода все еще играет очень важную роль в нашей повседневной жизни. Точные краткосрочные и долгосрочные прогнозы погоды имеют огромное экономическое значение для широкого круга секторов экономики (сельского хозяйства, энергетики, страхования, ...). Кроме этого современное общество до сих пор очень уязвимо к экстремальным погодным явлениям, которые часто приводят к огромным человеческим и экономическим потерям. Согласно докладу Всемирной Метеорологической Организации (ВМО) [1] в период с 1970 по 2019 годы было зафиксировано более 11 тысяч бедствий, связанных с экстремальными метеорологическими и гидрологическими явлениями. В результате этого погибло около 2 миллионов человек, а экономические потери составили 3.64 триллиона долларов США. На метеорологические, климатические и гидрологические бедствия приходится 50% от всех зарегистрированных за эти 50 лет бедствий, 45% связанных с ними смертей и 74% связанных с ними экономических потерь. При этом наблюдается явная тенденция к увеличению количества экстремальных погодных явлений, которую в первую очередь связывают с климатическими изменениями. Так, за рассматриваемый пятидесятилетний период времени количество природных катаклизмов увеличилось приблизительно в пять раз. На территории Российской Федерации также наблюдается заметное увеличение частоты возникновения опасных погодных явлений [2]: в период с 1990 по 2000 год ежегодно фиксировалось порядка 150-200 опасных явлений, начиная с 2004 наблюдается не меньше 300 случаев, в среднем каждые два года, начиная с 2007 года, этот показатель превышает цифру в 450 случаев.

Можно ожидать, что в ближайшее время мы будем наблюдать увеличение частоты и масштаба подобных явлений, а значит и рост экономических потерь и человеческих жертв, связанных с ними. Одновременно с этим в докладе [1] отмечается заметное уменьшение смертности от природных катаклизмов

(приблизительно в 3 раза), которое в первую очередь связано с развитием и совершенствованием систем заблаговременного предупреждения об опасных погодных явлениях – вероятно, одного из основных и самых эффективных способов защиты от этих явлений. Одним из ключевых элементов таких систем является система прогнозирования и анализа опасных погодных явлений и их последствий, которая в свою очередь основывается на применении численных моделей динамики атмосферы.

Глобальные (покрывающие всю Землю) математические модели общей циркуляции атмосферы – основной инструмент получения детерминистических прогнозов погоды на срок от 3 до 10 суток, а также являются необходимой частью систем вероятностного долгосрочного прогнозирования. Подобные модели состоят из блока численного решения трехмерных уравнений гидротермодинамики атмосферы и блока параметризованного описания процессов масштаба меньше размера ячейки сетки. В блоке описания процессов подсеточного масштаба, как правило, используются приближенные одномерные (по вертикали) модели таких процессов, как перемешивание в пограничном слое атмосферы, мелкомасштабная конвекция, перенос излучения и других, что позволяет учесть влияние их на компоненту потока, разрешаемую на сетке.

При повышении пространственного разрешения моделей атмосферы часть процессов, которые описывались приближенными одномерными моделями, становятся разрешимыми на сетке и могут моделироваться явно, путем решения трехмерных уравнений гидротермодинамики, что априори более точно. Кроме этого при повышении разрешения более точно описывается поверхность Земли (высота рельефа, тип подстилающей поверхности) и её влияние на атмосферный поток. Таким образом, повышение пространственного разрешения является одним из основных способов повышения качества прогноза погоды.

Системы глобального численного среднесрочного прогноза погоды собственной разработки развивают лишь ведущие страны: США, Англия, Канада, Франция, Германия, Япония, Китай и Россия. Модели атмосферы, используемые в этих системах, имеют разрешение 8-20 км, характерное число процессорных ядер 1-10 тысячи [3]. Мировым лидером по точности прогноза является Европейский центр среднесрочного прогноза погоды (ЕЦСПП), модель которого имеет разрешение 9 км, расчеты производятся с использованием 12000 ядер. Самые скромные требования к вычислительным ресурсам у модели ПЛАВ [4], использующейся оперативно в Гидрометцентре РФ (совместная разработка с

Институтом Вычислительной Математики им. Г.И. Марчука РАН). Эта модель при разрешении в 20 км соответствует требованиям к оперативности прогноза погоды, используя всего 288 ядер (обычная конфигурация модели задействует около 1000 ядер). В настоящее время идет активная разработка перспективных моделей атмосферы с разрешением 1–5 километров (так называемые модели нового поколения). Такие модели должны эффективно использовать 10^4 - 10^5 процессорных ядер, чтобы соответствовать требованиям к оперативности расчетов [5]. Поэтому повышение масштабируемости программных комплексов моделей атмосферы является одним из приоритетных направлений развития в области численного прогноза погоды.

Эффективная параллельная реализация на таком количестве ядер является серьезным вызовом, определяющим следующие черты перспективных моделей атмосферы:

- все вычисления выполняются в сеточном пространстве, используются только методы, требующие локальных пересылок данных между процессорами;
- используется сетка с квазиравномерным разрешением на сфере;
- используются явные методы интегрирования по времени, позволяющие достичь высокой масштабируемости (пусть и в ущерб вычислительной эффективности), либо неявные методы в совокупности с масштабируемым блоком решения эллиптических уравнений.

Помимо этого, на алгоритмы, которые потенциально могут применяться в моделях атмосферы, накладываются дополнительные ограничения, связанные с свойствами получаемых численных решений:

- отсутствие вычислительных волновых мод, реалистичные фазовые скорости воспроизводимых волн вплоть до самых мелких масштабов;
- правильное описание сбалансированных движений и процесса перехода к ним;
- возможность построения схем высокого порядка аппроксимации (выше второго) без необходимости использования вычислительно сложных алгоритмов и структур данных;
- минимизация эффекта "отпечатка сетки", когда структура сетки приводит к появлению в численном решении характерных ошибок, проявляющихся неравномерно по сфере.

Разработать метод, удовлетворяющий всем приведенным требованиям одновременно, не представляется возможным. Поэтому вопрос выбора наиболее значимых требований и построение масштабируемых методов, позволяющих удовлетворить их максимальному количеству, на сегодняшний день является предметом большого количества исследований.

Степень разработанности темы исследования. Далее приводится обзор подходов и методов, реализуемых в перспективных моделях атмосферы.

Сетки с квазиравномерным разрешением на сфере. Важной проблемой разработки моделей с горизонтальным разрешением менее 10 км является выбор вычислительной сетки на сфере. Регулярная широтно-долготная сетка, безальтернативно применявшаяся в моделях атмосферы последние 40-50 лет, при таком разрешении не может быть использована вследствие ее неоднородности, обусловленной сходимостью меридианов к полюсам. При разрешении 10 километров на экваторе шаг сетки по долготе около полюса будет величиной порядка 10 метров (шаг по широте будет равен 10 километрам). Подобная анизотропия приводит к непродуктивным затратам вычислительных ресурсов (на обсчет "лишних точек"), сильному ограничению на шаг по времени (устойчивость определяется самым маленьким шагом сетки), некорректной работе блока параметризаций подсеточного масштаба. В настоящее время предложено достаточно много альтернативных сеток с квазиравномерным разрешением на сфере [6]. Наиболее популярны следующие варианты.

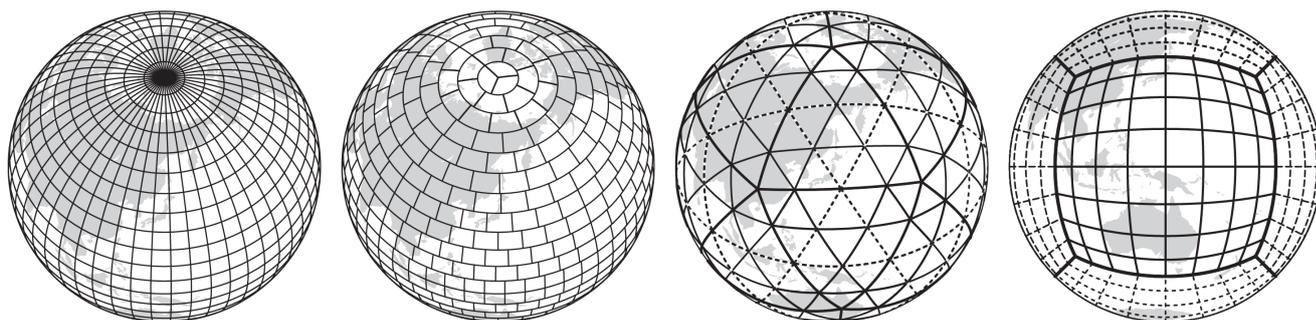


Рисунок 1 — Возможные варианты горизонтальных сеток на сфере. Слева направо: регулярная и редуцированная широтно-долготные сетки, икосаэдральная (треугольная) сетка, кубическая сфера. Рисунки взяты из работы [7].

Кубическая сфера [8], образованная центральной проекцией равномерной сетки на гранях куба на сферу. К достоинствам сетки можно отнести

высокую однородность разрешения (отношение максимального/минимального шага сетки около 1.3), простоту логической структуры, "правильное" соотношение количество векторных и скалярных степеней свободы 2 : 1 при использовании разнесения переменных. Недостатки данного варианта — неортогональность криволинейной системы координат, излом координатных линий сетки на ребрах куба. Данная сетка выбрана для перспективной модели метеослужбы Великобритании [9; 10] и для новой модели FV3 национального центра прогнозирования окружающей среды [11].

Икосаэдральная сетка, основанная на применении центральной проекции граней икосаэдра, разбитых на равные треугольники, на сферу. Применяется в модели ICON немецкой метеослужбы [12]. Основное преимущество сетки — однородность ячеек по линейным размерам и по площадям. Недостатком является сложность построения численных схем высокого порядка аппроксимации, неправильное соотношение количества скалярных переменных к векторным (горизонтальным) — 2 : 3, вместо 1 : 2, что приводит к возникновению вычислительных мод [6]. Существует вариант икосаэдральной сетки с разбиением на шестиугольники, свободный от данного недостатка, однако полностью покрыть сферу шестиугольниками невозможно, у такой сетки есть пятиугольные элементы [6].

Сетка Инь-Янь [13] — композиция из двух региональных регулярных широтно-долготных сеток, повернутых друг относительно друга на 90 градусов. Применяется в канадской оперативной модели GEM [14]. Достоинством сетки является возможность использования численных методов и программного кода моделей на регулярной широтно-долготной сетке. Недостаток — сложности совмещения решений в областях наложения региональных сеток.

Редуцированная широтно-долготная сетка [15] строится путем уменьшения количества узлов по долготе при приближении к полюсам. Данная сетка используется в оперативной спектральной модели Европейского центра среднесрочных прогнозов (ЕЦСПП). Редуцированная сетка также может опционально использоваться в модели ПЛАВ [4], применяемой для оперативного среднесрочного прогноза погоды в Гидрометцентре РФ. Однако при существующем разрешении это нецелесообразно. Достоинства редуцированной широтно-долготной сетки — простота структуры и возможность широкого использования подходов и программного кода от модели на регулярной сетке, сонаправленность сеточных параллелей основному направлению струйных течений в верхней

тропосфере и стратосфере (с запада на восток), что повышает точность их воспроизведения. Недостаток сетки – неконформность ячеек сетки, что несколько затрудняет вычисление производных по широте (в модели ЕЦСПП для этого применяется представление полей сферическими гармониками, в модели ПЛАВ вычисляются производные по широте от коэффициентов разложения Фурье по долготе). Аналог данной сетки в цилиндрической системе координат применяется в программном комплексе для астрофизических расчетов DISCO [16], где для аппроксимации операторов используется метод конечных объемов с кусочно-линейным восполнением с ограничителем наклона.

Таким образом, в мире рассматривается большое количество сеток с квазиравномерным разрешением на сфере, каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки.

Аппроксимация по горизонтали. Метод конечных разностей не отвергается, но достижение высокого порядка аппроксимации и построение схем, обладающих дискретными аналогами законов сохранения, на сетках сложной структуры затруднено. Этот метод применяется в модели ICON на икосаэдральной сетке [12].

Метод конечных объемов популярен благодаря выполнению закона сохранения массы "по построению". На сетках со сложной геометрией сложно достичь высокого порядка аппроксимации. Применяется в модели FV3 [11] и в модели ICON [12] для адвективных слагаемых уравнений (слагаемых, описывающих перенос).

Метод конечных элементов позволяет получить дискретные операторы, обладающие аналогами свойств аналитических операторов [6; 10; 17]. Например, равенство нулю вихря от градиента давления, чего непросто достигнуть на сетках со сложной геометрией. Такой подход применяется в перспективной модели метеослужбы Великобритании GungHo. Порядок аппроксимации при таком подходе, как правило, ограничивается вторым, также возникает необходимость обращения матрицы масс.

Методы спектральных элементов [18], разрывный метод Галеркина [19]. Данные вариации метода конечных элементов позволяют достигать высокого порядка аппроксимации и обладают прекрасными характеристиками для параллельных вычислений (минимальный шаблон, малое количество обменов между процессорами). Недостатком является в 10 раз более жесткий критерий устойчивости Куранта (по сравнению с методом конечных разностей). Методы

реализованы в климатической модели CAM Национального центра атмосферных исследований США (NCAR).

К вопросам выбора горизонтальной аппроксимации относится и выбор типа разнесения сетки, определяющего численные характеристики распространения инерционно-гравитационных волн, которым уделяется большое внимание в метеорологии. Приемлемые дисперсионные характеристики получаются при разнесении типа "C" и "Z" [20].

При разнесении типа "C" на регулярной широтно-долготной сетке меридиональная компонента скорости сдвинута относительно давления на полшага сетки по широте, а долготная компонента – на полшага сетки по долготе. Обобщение на сетки со сложной геометрией – давление определено в центрах ячеек сетки, а в центрах граней ячеек определены компоненты скорости, перпендикулярные грани.

При разнесении типа "Z" компоненты скорости и давление определены в одних точках, но уравнения для горизонтального ветра сформулированы в переменных горизонтальная дивергенция, вертикальная компонента завихренности. Это приводит к необходимости решения уравнений Пуассона для восстановления горизонтальных компонент скорости из завихренности и дивергенции, что осложняет эффективную параллельную реализацию модели. Поэтому разнесение типа "C" применяется в большинстве моделей с аппроксимацией в сеточном пространстве. Единственная оперативная модель с разнесением типа "Z" – модель ПЛАВ.

Тип дискретизации по времени. В глобальных моделях атмосферы шаг по времени ограничивается, главным образом, условиями Куранта по скорости ветра (скорости адвекции) и фазовой скорости "быстрых" волн (мелкомасштабных инерционно-гравитационных и, при негидростатической постановке, вертикально-распространяющихся звуковых). Условие Куранта по скорости ветра не ограничивает шаг по времени, если для представления адвективных слагаемых используется полулагранжев подход [21] (полная производная по времени дискретизируется вдоль траекторий лагранжевых частиц, приходящих к концу шага по времени в точки фиксированной вычислительной сетки). Благодаря возможности вычислений с большим шагом по времени, полулагранжев подход сейчас используется в большинстве оперативных моделей прогноза погоды. В то же время, часть перспективных моделей склоняются к выбору Эйлера подхода, что обусловлено недостатками полулагранжева метода: формальным

отсутствием сохранения массы. В последнее время, однако, появились полулагранжевы методы, сохраняющие массу [22; 23].

Скорость распространения "быстрых" волн серьезно ограничивает допустимый шаг по времени в моделях атмосферы, в то время как с метеорологической точки зрения наиболее значимыми являются сравнительно медленные процессы. Проблема "быстрых" волн может быть решена применением полунявной схемы интегрирования по времени [24]. При этом масштабируемость полунявного метода определяется масштабируемостью алгоритма решения возникающих уравнений Гельмгольца. Для сетки кубическая сфера показано, что многосеточные решатели уравнений Гельмгольца эффективно масштабируются вплоть до 60 тысяч ядер [25].

Таким образом повышение масштабируемости программных комплексов моделей атмосферы является одним из **актуальных** и приоритетных направлений развития в области численного прогноза погоды и моделирования климата, требующих разработки и исследования свойств новых вычислительных методов и алгоритмов, а также их эффективной реализации на массивно-параллельных вычислительных системах.

Целью диссертационной работы является разработка точных, экономичных и масштабируемых методов решения глобальных уравнений динамики атмосферы с высоким пространственным разрешением.

Для достижения данной цели в диссертации рассматривается вопрос построения горизонтальных аппроксимаций на квазиравномерных сетках на сфере в сеточном пространстве, а также вопрос разработки параллельных решателей эллиптических уравнений на сфере. Разработанные методы должны быть масштабируемыми и обладать высокой точностью. Предполагается, что разработанные алгоритмы будут использованы в перспективной версии глобальной модели динамики атмосферы ПЛАВ высокого разрешения.

Для достижения поставленной цели было необходимо решить следующие **задачи**:

1. Разработать и реализовать точные, экономичные и масштабируемые методы аппроксимации горизонтальных операторов на сетке с квазиравномерным разрешением на сфере – редуцированной широтно-долготной сетке.
2. Разработать и реализовать масштабируемый алгоритм решения уравнений эллиптического типа, характерных для полунявных моделей

глобальной динамики атмосферы, на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере.

3. Провести комплексную оптимизацию параллельной структуры и алгоритмов программного комплекса глобальной модели атмосферы ПЛАВ.

В работе используются следующие методы и подходы: теория и методы вычислительной математики для решения дифференциальных уравнений в частных производных и приближенного решения систем линейных алгебраических уравнений; численные эксперименты в рамках модельных гидродинамических систем уравнений различной сложности; современные инструменты для разработки, распараллеливания и профилирования программных комплексов.

Научная новизна заключается в том, что впервые:

1. Предложен подход для аппроксимации горизонтальных операторов на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере с разнесением переменных.
2. Предложен общий подход для построения консервативных схем на редуцированной-широтно долготной сетке на сфере.
3. Предложен параллельный геометрический многосеточный алгоритм на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере.

Теоретическая значимость. В работе предложено обобщение понятия расчетной сетки с разнесением типа "С" на случай редуцированной широтно-долготной сетки на сфере. Предложен подход для построения конечно-разностных горизонтальных операторов на этой сетке, сформулированы и доказаны необходимые и достаточные условия наличия дискретных аналогов законов сохранения массы и полной энергии для этих аппроксимаций. Проведено численное исследование точности, сходимости и дисперсионных характеристик предложенных аппроксимаций. Предложен геометрический многосеточный алгоритм решения эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере и проведено численное исследование скорости сходимости этого метода.

Практическая значимость. Разработан программный комплекс, реализующий предложенные методы аппроксимации на сфере. На основе данного программного комплекса реализована модель мелкой воды на сфере. Реализован параллельный геометрический многосеточный алгоритм решения эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере, проведено исследование параллельной масштабируемости алгоритма. Реализо-

ван ряд модификаций и уточнений в программный комплекс глобальной модели атмосферы ПЛАВ, позволивший существенно сократить время расчетов без ухудшения точности прогноза.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Новый подход для аппроксимации горизонтальных операторов на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных на сфере.
2. Необходимые и достаточные условия наличия дискретных аналогов законов сохранения при использовании предложенного подхода для дискретизации горизонтальных операторов на сфере и алгоритм построения дискретизаций, удовлетворяющих данным условиям.
3. Параллельный многосеточный метод решения эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере.
4. Методы повышения вычислительной и параллельной эффективности программного комплекса глобальной модели атмосферы ПЛАВ.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, обоснована всесторонним аналитическим и численным исследованием предложенных методов и подходов на тестовых задачах, включающих в себя численные эксперименты в рамках упрощенных моделей глобальной динамики атмосферы. Материал, изложенный в диссертации, опирается на широкий список научной литературы, посвящённый рассматриваемым методам и их аналогам.

Апробация работы. Автор лично докладывал основные результаты работы на следующих международных и российских конференциях: "PDES on the sphere 2019", Монреаль, Канада, 2019; "PDES on the sphere 2021", онлайн, Оффенбах, Германия, 2021; международная конференция "Суперкомпьютерные дни в России", Москва, Россия, 2016, 2021; 58-я, 59-я, 60-я, 61-я, 62-я научные конференции МФТИ, Москва, Россия, 2015–2019; ECMWF annual seminar "Numerical methods for atmospheric and oceanic modeling: recent advances and future prospects", 2020, онлайн; международная конференция "Вычислительная математика и приложения", 2021, Сириус, Россия; Международная молодежная школа и конференция по вычислительно-информационным технологиям для наук об окружающей среде: "CITES-2017", 2017, "CITES-2019", 2019, "CITES-2021", 2021, Москва, Россия; 21-я Всероссийская школа-конференция молодых ученых "Состав атмосферы. Атмосферное электричество. Климатические процессы" (СатЭП-2017), Борок, Россия, 2017; Международная

конференция "СРТ1617", 2016, Ларнака, Кипр;

Соискатель также является **соавтором** докладов, в рамках которых результаты данной работы представлялись на следующих конференциях: международная конференция "Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2019)", 2019, Калининград, Россия; международная конференция "Mathematics of Weather 2019", 2019, Бад-Орб, Германия; международная конференция "Суперкомпьютерные дни в России", 2017–2020, Москва, Россия; семинар "Суперкомпьютерное моделирование климатической системы", 2019, Москва, Россия; международные конференции "Марчуковские научные чтения 2020", "Марчуковские научные чтения 2021", 2020, 2021, Новосибирск, Россия; международная конференция "4th International Conference on Computer Simulations in Physics and beyond", 2020, Москва, Россия; Десятая сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям (SibHPC'21), 2021, Томск, Россия.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 10 работ [4; 26–34], из них 4 работы [4; 26–28] индексируются в международных базах данных Scopus или Web of Science и входят в перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени кандидата наук; 5 работ [29–33] опубликованы в сборниках трудов конференций, 1 работа [34] – монография.

Личный вклад. Идея построения редуцированной сетки с разнесением переменных предложена В.В. Шашкиным. Остальные изложенные в диссертации результаты получены лично автором. Автор принимал участие как в постановке задачи, так и в проведение теоретических исследований, численных экспериментов и интерпретации полученных результатов.

Объем и структура диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и приложения. Полный объем диссертации составляет 140 страниц, включая 36 рисунков и 5 таблиц. Список литературы содержит 110 наименований.

Содержание работы. **Первая** глава диссертации посвящена построению горизонтальных аппроксимаций на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных. Исследуются свойства консервативности предложенных аппроксимаций, описывается подход для построения консервативных схем. Свойства рассматриваемых схем исследуются численно в рамках уравнений мелкой воды на сфере. **Вторая** глава диссертации посвящена разработке и

реализации геометрического многосеточного алгоритма решения эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетки. Производится анализ модельной системы уравнений, возникающей вследствие применения полуняевского метода аппроксимации по времени уравнений мелкой воды. Приводится описание параллельной реализации многосеточного алгоритма. Исследуется сходимость и масштабируемость предложенного алгоритма. В **третьей** главе диссертации приводится описание работ, целью которых является повышение параллельной и вычислительной эффективности программного комплекса глобальной модели атмосферы ПЛАВ. В частности, описывается внедрение полулагранжевого алгоритма адвекции с динамической адаптацией ширины обменов, частичное внедрение чисел с плавающей точкой одинарной точности, модификация структуры данных и алгоритмов с целью повышения эффективности использования памяти процессора. В **заключении** перечислены основные результаты работы.

Благодарности. Автор выражает благодарность научному руководителю Толстых М.А., соавторам работ Шашкину В.В. и Фадееву Р.Ю. а также коллегам из Института вычислительной математики РАН и Гидрометцентра России за всестороннюю помощь и поддержку в ходе выполнения данной работы.

Работа поддержана грантами РФФИ (21-71-30023, 14-27-00126, 14-37-00053), грантами РНФ (19-31-90032, 17-05-01227) и Московским центром фундаментальной и прикладной математики (Соглашение с Минобрнауки России № 075-15-2019-1624).

Глава 1. Горизонтальные аппроксимации на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных

Одним из важнейших направлений исследований в области численного решения уравнений динамики атмосферы является построения горизонтальных аппроксимаций дифференциальных операторов на квазиравномерных сферических сетках. Целью этих исследований является поиск альтернатив традиционной регулярной широтно-долготной сетке, которая исторически была основным и практически безальтернативным выбором для глобальных моделей численного прогноза погоды и моделирования климата.

Помимо вопросов точности аппроксимаций в рамках этих исследований большое внимание уделяется [6] дисперсионным характеристикам распространения численных волн, отсутствию явления отпечатка сетки (влияние особенностей структуры сетки на вид ошибки), возможности построения консервативных схем, наличию свойств аналогов аналитических свойств операторов (например, равенство нулю дивергенции ротора) и возможности эффективной параллельной реализации. В целом каждая из предложенных на сегодняшний день схем имеет сильные и слабые стороны, поэтому до сих пор нет единого мнения об оптимальном выборе подхода для горизонтальной аппроксимации уравнений динамики атмосферы. Тем не менее можно выделить следующие основные черты, которыми должны обладать наиболее перспективные варианты:

- локальность дискретизаций ("локальные схемы"), это означает что для вычисления в данной точке требуется только информация из соседних точек. Это требование имеет решающее значение для эффективной параллельной реализации методов;
- для построения аппроксимаций используется сетка с разнесением переменных типа "С" [35] или неразнесенная сетка в совокупности с методами высокого порядка аппроксимации (выше 2). Это требование важно для наличия реалистичных фазовых скоростей воспроизводимых волн и для корректного воспроизведения сбалансированных движений и процесса перехода к ним;
- возможность построения консервативных схем;
- влияние эффекта отпечатка сетки незначительно;

- отсутствие нефизичных волновых мод или возможность их эффективно подавления.

Наиболее популярные среди предложенных на сегодняшний день подходов основаны на использовании неструктурированных сеток [12; 36; 37], сеток с перекрытием [13; 14] или сеток, основанных на криволинейных неортогональных сферических систем координат [38–40]. Сравнительно небольшое количество работ [41; 42] посвящено построению и анализу локальных дискретизаций на редуцированной широтно-долготной сетке. Основными недостатками данной сетки являются, во-первых, неконформность ячеек сетки, что не позволяет напрямую применить известные универсальные подходы для построения аппроксимаций (стандартные формулировки методов конечных объемов или конечных элементов предполагают наличия этого свойства), во-вторых, вырожденность системы координат в полюсных точках, что также требует некоторых дополнительных усилий при построении схем. В то же время, такая сетка обладает рядом потенциальных преимуществ:

- сетка основана на ортогональной криволинейной системе координат, что заметно упрощает формулировку уравнений и построение методов аппроксимации;
- сетка обладает частичной структурой, что опять-таки упрощает построение методов аппроксимации и положительным образом сказывается на эффективности их программной реализации;
- основные атмосферные течения сонаправлены координатным линиям сетки;
- структура алгоритмов и их программная реализация не сильно отличается от случая регулярной широтно-долготной сетки, что делает возможным повторное использование исходного кода (с небольшими изменениями) моделей, использующих регулярную широтно-долготную сетку. Кроме того, далее будет показано, что построение схем аппроксимации на редуцированной сетки может быть основано на использовании известных схем на регулярной сетке.

Из всех описанных выше вариантов сферических сеток редуцированная сетка является одним из самых плохо изученных. Так, до сих пор не было предпринято попыток использовать редуцированную сетку с разнесением переменных. Кроме того, не было предложено подходов для строгого анализа свойств дискретизаций, таких как сохранение массы и энергии, выполнения дискретных

аналогов тождеств векторного исчисления, дисперсионные характеристики численных волн и наличие нефизичных волновых мод. Результаты, описанные в данной главе, посвящены устранению этих пробелов.

Основные результаты данной главы были опубликованы в работе [26]. Глава состоит из пяти разделов. В разделе 1.1 приводятся различные формы уравнений мелкой воды на сфере, которые будут использоваться в качестве модельных уравнений для исследования свойств предложенных разностных схем. В разделе 1.2 описывается предложенное определение редуцированной сетки с разнесением переменных. Раздел 1.3 посвящен построению и исследованию аппроксимаций на редуцированной сетке с разнесением переменных в рамках линеаризованных уравнений мелкой воды на сфере. В разделе 1.4 рассматривается разработка полунявной полулалгранжевой модели нелинейных уравнений мелкой воды на сфере, основанная на применении предложенных горизонтальных аппроксимаций. В разделе 1.5 приведен обзор основных результатов данной главы.

1.1. Уравнения мелкой воды на вращающейся сфере

При разработке алгоритмов для моделировании сложных физических систем, таких как атмосфера или океан, часто бывает полезно начать с рассмотрения упрощенной системы, которая сохраняет некоторые ключевые характеристики исходной системы. Уравнения мелкой воды представляют собой упрощенный вариант полностью сжимаемых уравнений Эйлера – они имеют аналогичные законы сохранения, описывают распространение многих из тех же типов волн и подобное (квази) сбалансированное состояние. Эти уравнения описывают движение вращающейся, несжимаемой, невязкой двумерной жидкости. Решения этих уравнений содержат как вращательные, так и дивергентные движения наряду с инерционно-гравитационными волнами и волнами Россби. Существование геострофически-сбалансированных режимов течения и соответствующих процессов приспособления близко имитирует аналогичные процессы в полных уравнениях. Кроме того, уравнения мелкой воды обладают рядом аналогичных интегральных инвариантов (масса, энергия) и лагранжевых инвариантов (потенциальная завихренность, потенциальная энстрофия). Все эти

свойства делают их идеальной системой для разработки и тестирования новых численных методов моделирования атмосферы. На сегодняшний день испытания в рамках модели мелкой воды на вращающейся сфере – общепринятый первый этап разработки новых методов для аппроксимации уравнений динамики атмосферы по времени и пространству (по горизонтали), существует ряд широко используемых стандартных идеализированных тестов [43–46].

В рамках данной работы, уравнения мелкой воды на вращающейся сфере будут использоваться для тестирования предложенных методов построения горизонтальных аппроксимаций на редуцированной широтно-долготной сетке. Будут использоваться несколько различных форм, а также линеаризованный вариант этих уравнений.

Векторно-инвариантная Эйлера форма.

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = (f + \xi) \mathbf{v}^\perp - \nabla(K + g(h + h_s)), \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nabla \cdot (h \mathbf{v}). \quad (1.2)$$

В этой системе уравнений $\mathbf{v} = (u, v)$ – компоненты разложения вектора скорости по базисным векторам сферической системы координат (\mathbf{i}, \mathbf{j}) ; $\mathbf{v}^\perp = (v, -u)$ – вектор, ортогональный вектору скорости; h_s, h – высота уровня поверхности (орографии) и отклонение уровня жидкости от уровня поверхности; $K = \frac{u^2 + v^2}{2}$ – плотность кинетической энергии; $\xi = \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{v}$ – вертикальная компонента вектора относительной завихренности; \mathbf{k} – единичный вектор, направленный вдоль внешней нормали к поверхности сферы; $f = 2\Omega \sin \varphi$ – параметр Кориолиса, Ω – угловая скорость вращения сферы; g – ускорение свободного падения. Операторы горизонтального градиента, горизонтальной дивергенции и вертикальной компоненты относительной завихренности в сферической системе координат выражаются как

$$\nabla q = \left(\frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial q}{\partial \lambda}, \frac{1}{a} \frac{\partial q}{\partial \varphi} \right)^\top, \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial u}{\partial \lambda} + \frac{\partial (v \cos \varphi)}{\partial \varphi} \right), \quad (1.4)$$

$$\mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{v} = \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial v}{\partial \lambda} - \frac{\partial (u \cos \varphi)}{\partial \varphi} \right). \quad (1.5)$$

Здесь a – радиус сферы. Векторно-инвариантная форма уравнений является удобной для построения схем дискретизации по пространству, обладающими

дискретными аналогами законов сохранения [35; 47]. Также использование этой формы позволяет не вычислять явным образом метрические слагаемые пропорциональные $\operatorname{tg} \varphi$, неограниченно растущие вблизи полюсов.

Лагранжева форма.

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = f\mathbf{v}^\perp - g\nabla(h + h_s), \quad (1.6)$$

$$\frac{dh}{dt} = -h\nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (1.7)$$

Здесь d/dt обозначает Лагранжеву производную по времени (производная вдоль траектории частицы, движущейся вместе с жидкостью).

Линеаризованные уравнения. Производя линеаризацию нелинейных уравнений относительно стационарного состояния с нулевой скоростью и постоянной высотой отклонения уровня жидкости H , получаем линеаризованную систему уравнений мелкой воды

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = f\mathbf{v}^\perp - g\nabla(h + h_s), \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -H\nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (1.9)$$

1.2. Редуцированная сетка с разнесением переменных

Положение точки на сфере определяется при помощи долготы $\lambda \in [0, 2\pi)$ и широты $\varphi \in [-\pi/2, \pi/2]$. Локальный ортонормированный базис криволинейной системы координат определяется единичными векторами \mathbf{i} , \mathbf{j} касательными к поверхности сферы и указывающими в направлении с запада на восток и с юга на север соответственно.

Редуцированную широтно-долготную сетку с разнесением переменных определим как набор точек расположенных на широтах $\varphi_j, j \in [1, N_\varphi]$ и $\varphi_{j+\frac{1}{2}}, j \in [0, N_\varphi]$ с постоянным шагом по долготе $\Delta\lambda_j = 2\pi/N_j^\lambda, \Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = 2\pi/N_{j+\frac{1}{2}}^\lambda$, где N_j^λ – количество узлов равномерной сетки вдоль долготы на широте φ_j . Предполагается что $\varphi_{\frac{1}{2}}, \varphi_{N_\varphi+\frac{1}{2}}$ равны $-\pi/2$ и $\pi/2$ соответственно. Скалярные

величины (высота уровня жидкости, горизонтальная дивергенция, ...) располагаются в узлах сетки с координатами φ_j , $\lambda_{i,j} = (i - 1)\Delta\lambda_j$, $i \in [1, N_j^\lambda]$, в дальнейшем эти узлы сетки мы будем называть h -точками. Зональные компоненты векторов расположены в узлах сетки с координатами φ_j , $\lambda_{i-\frac{1}{2},j} = (i - \frac{3}{2})\Delta\lambda_j$, $i \in [1, N_j^\lambda]$. Такие точки будем обозначать как u -точки. Эти точки сдвинуты в зональном направлении относительно h -точек на пол шага сетки. Наконец, меридиональные компоненты векторов определены в узлах сетки с координатами $\varphi_{j+\frac{1}{2}}$, $\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} = (i - 1)\Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}}$, $i \in [1, N_{j+\frac{1}{2}}^\lambda]$. Эти узлы будем называть v -точками сетки. Схематичное изображение участка редуцированной сетки с разнесением переменных приведено на рисунке 1.1.

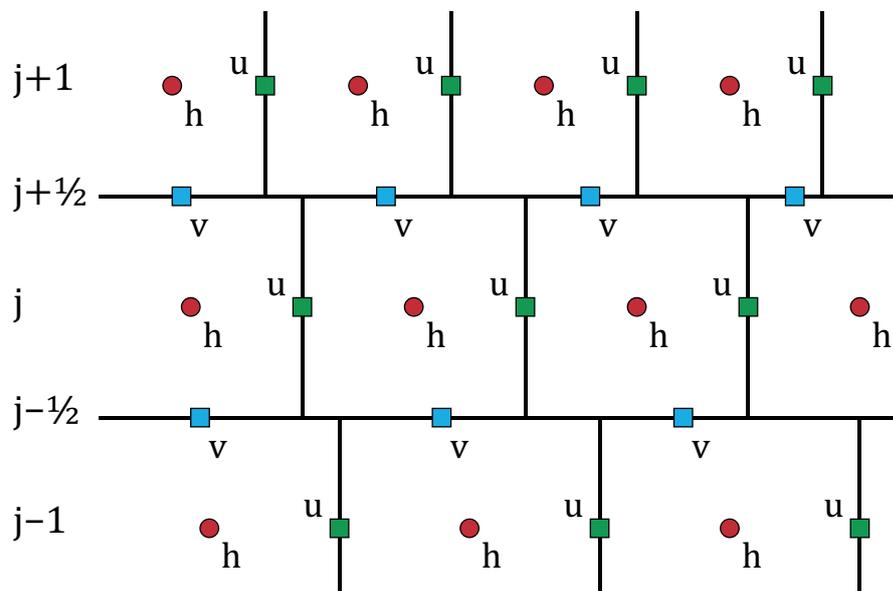


Рисунок 1.1 — Схематичное изображение расположения узлов редуцированной широтно-долготной сетки с разнесением переменным.

Определенную таким образом сетку можно рассматривать как аналог разнесения типа "С" [35] на случай редуцированной сетки. При этом отметим, что, строго говоря, определенное таким образом разнесение переменных не является разнесением типа "С", так как v -компоненты скорости расположены не в центрах граней ячеек вычислительной сетки. Использование стандартного подхода для построения редуцированной сетки с разнесением переменных типа "С" привело бы к нескольким нежелательным последствиям. Во-первых, потребовалось бы использовать сетку с переменным шагом по долготе для v -узлов сетки. Это заметно бы усложнило построение методов дискретизации и их практическую реализацию. Во-вторых, такой подход не позволяет обеспечить правильное соотношение 2:1 между количеством векторных (горизонтальных) и

скалярных степеней свободы, что может приводить к распространению ложных мелкомасштабных волн Россби [6; 48]. Далее, для краткости, будем называть редуцированную сетку с разнесением переменных ”редуцированной C-сеткой”.

Обсуждение возможных вариантов для выбора алгоритма построения редуцированной широтно-долготной сетки, а также описание конфигураций сеток, используемых в численных экспериментах, будет представлено ниже.

Значение некоторой сеточной функции q в узле сетки с координатами φ_j , $\lambda_{i,j}$ будем обозначать как $q_{i,j}$. Также будем использовать q_j для обозначения вектора, содержащего значения сеточной функции вдоль круга фиксированной широты, то есть

$$q_j = \left(q_{1,j}, q_{2,j}, \dots, q_{N_j^\lambda, j} \right)^T. \quad (1.10)$$

Использование таких обозначений позволяет учесть наличие частичной структуры у редуцированной широтно-долготной сетки и заметно упрощает запись и анализ разностных схем, рассматриваемых ниже.

1.3. Исследование свойств пространственных дискретизаций линеаризованных уравнений мелкой воды

Демонстрацию и первичное исследование свойств предлагаемого автором подхода к построению дискретизаций на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных предлагается производить в рамках линеаризованных уравнений мелкой воды (1.8). Покомпонентная запись данных уравнений:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - fv + \frac{g}{a \cos \varphi} \frac{\partial(h + h_s)}{\partial \lambda} = 0, \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + fu + \frac{g}{a} \frac{\partial(h + h_s)}{\partial \varphi} = 0, \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{H}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial u}{\partial \lambda} + \frac{\partial(v \cos \varphi)}{\partial \varphi} \right) = 0. \quad (1.13)$$

Задача построения горизонтальных аппроксимаций в сферической системе координат естественным образом разделяется на задачу зональной и меридиональной аппроксимации, и эти задачи можно рассматривать независимо друг

от друга. Структура редуцированной широтно-долготной сетки вдоль зонального направления не отличается от структуры регулярной сетки, что позволяет применять известные стандартные схемы. Поэтому в данном разделе мы будем рассматривать только построение аппроксимации членов, описывающих действие силы Кориолиса, и меридиональных частей дифференциальных операторов.

Основным препятствием для построения разностных схем на редуцированной сетке является тот факт, что узлы сетки, расположенные на соседних широтах, не лежат вдоль одной координатной линии в меридиональном направлении. Возможное решение, выбранное здесь, состоит в том, чтобы использовать некоторую процедуру одномерной интерполяции вдоль зонального направления для получения значений сеточных функций в точках, необходимых для вычислений. Такой подход позволяет использовать любые известные разностные схемы для регулярной сетки в качестве основы, дополняя их подходящей процедурой интерполяции. Однако свойства полученных схем (порядок аппроксимации, наличие законов сохранения, дисперсионные характеристики распространения численных волн) будут зависеть от выбранной процедуры интерполяции, и эти аспекты требуют дополнительного анализа.

Далее для простоты и ясности изложения рассматриваются разностные схемы, основанные на схемах второго порядка точности для регулярной широтно-долготной сетки. При этом полученные результаты легко обобщаются для схем более высокого порядка. Более того, предлагаемый подход также подходит для анализа схем на неразнесенной широтно-долготной сетке.

Оператор градиента. Используется следующий общий вид разностной схемы, включающий значения сеточной функции на двух соседних широтах, для вычисления меридиональной части оператора градиента:

$$(\text{grad}_\varphi h)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{W_{j+\frac{1}{2}}^{j+1} h_{j+1} - W_{j+\frac{1}{2}}^j h_j}{a \Delta \varphi_{j+\frac{1}{2}}}. \quad (1.14)$$

Здесь $\Delta \varphi_{j+\frac{1}{2}} = \varphi_{j+1} - \varphi_j$; $W_{j+\frac{1}{2}}^{j+1}, W_{j+\frac{1}{2}}^j$ – матрицы, соответствующие одномерной процедуре интерполяции вдоль долготы. Интерполяция производится из узлов сетки с координатами $(\lambda_{i,j}, \varphi_j)$, $(\lambda_{i,j+1}, \varphi_{j+1})$ в точки с координатами $(\lambda_{i,j+1/2}, \varphi_j)$, $(\lambda_{i,j+1/2}, \varphi_{j+1})$. То есть происходит интерполяция значений функций из h -точек, расположенных на широтах φ_j , φ_{j+1} , в точки с долготными координатами v -узлов сетки, расположенных на широте $\varphi_{j+\frac{1}{2}}$.

Оператор дивергенции. Аналогичным образом записывается общий вид дискретизации для расчета меридиональной части оператора дивергенции

$$(\operatorname{div}_{\varphi} v)_j = \frac{W_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} - W_j^{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}}}{a \cos \varphi_j \Delta \varphi_j}. \quad (1.15)$$

Здесь $\Delta \varphi_j = \varphi_{j+\frac{1}{2}} - \varphi_{j-\frac{1}{2}}$; $W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}}, W_j^{j-\frac{1}{2}}$ – матрицы, соответствующие одномерной процедуре интерполяции вдоль долготы. Интерполяция производится из узлов сетки с координатами $(\lambda_{i,j+1/2}, \varphi_{j+1/2})$, $(\lambda_{i,j-1/2}, \varphi_{j-1/2})$ в точки с координатами $(\lambda_{i,j}, \varphi_{j+1/2})$, $(\lambda_{i,j}, \varphi_{j-1/2})$.

Сила Кориолиса. Одним из недостатков использования сетки с разнесением переменных типа "С" является необходимость дополнительной интерполяции значений меридиональных компонент скорости ветра в точки зональных компонент скорости ветра и наоборот:

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} - (fv)_j + \dots = 0, \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial v_{j+\frac{1}{2}}}{\partial t} + (fu)_{j+\frac{1}{2}} + \dots = 0. \quad (1.17)$$

При этом используемая интерполяционная процедура может значительно влиять на свойства распространения численных инерционно-гравитационных волн и волн Россби [49; 50]. В данной работе для построения разностной схемы в качестве основы предлагается использовать сохраняющую энергию схему, предложенную в работе [49]. Дополняя эту схему интерполяционными процедурами получаем следующий общий вид аппроксимации силы Кориолиса:

$$(fv)_j \approx \frac{1}{2 \cos \varphi_j} \left(S_j^{j+\frac{1}{2}} (v \cos \varphi)_{j+\frac{1}{2}} + S_j^{j-\frac{1}{2}} (v \cos \varphi)_{j-\frac{1}{2}} \right) \circ f_j, \quad (1.18)$$

$$(fu)_{j+\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2 \Delta \varphi_{j+\frac{1}{2}}} \left(S_{j+\frac{1}{2}}^{j+1} (f \circ u \Delta \varphi)_{j+1} + S_{j+\frac{1}{2}}^j (f \circ u \Delta \varphi)_j \right). \quad (1.19)$$

Аналогично предыдущим пунктам $S_j^{j+\frac{1}{2}}, S_{j+\frac{1}{2}}^j$ – матричное представление одномерных интерполяционных процедур вдоль долготного направления между u и v точками сетки, расположенных на широтах $\varphi_j, \varphi_{j+\frac{1}{2}}$. Знак \circ обозначает покомпонентное умножение векторов (параметр Кориолиса является функцией координат)

Стоит отметить, что применение обобщения исходной аппроксимации на регулярной сетке [22] в рамках нелинейных уравнений мелкой воды, приводит

к возникновению численной неустойчивости [51]. В [51] также было продемонстрировано, что использование альтернативных схем для аппроксимации силы Кориолиса может ослабить или полностью устранить данный вид численной неустойчивости. Применение предлагаемого подхода не ограничивается конкретным выбором схемы на регулярной сетке, взятой за основу для построения аппроксимации на редуцированной сетке, поэтому все результаты и анализ, представленные ниже, могут быть повторены и для других схем, в том числе рассмотренных в [51].

1.3.1. Исследование свойств консервативности

Определив общий вид дискретизаций, мы можем перейти к изучению свойств полученных схем. В этом разделе мы хотим получить ограничения на выбор процедуры одномерной интерполяции (матрицы W и S), которые обеспечивают наличие дискретных аналогов законов сохранения массы и полной энергии для полудискретных линеаризованных уравнений мелкой воды:

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} - (fv)_j + (\text{grad}_\lambda h)_j = 0, \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial v_{j+\frac{1}{2}}}{\partial t} + (fu)_{j+\frac{1}{2}} + (\text{grad}_\varphi h)_{j+\frac{1}{2}} = 0, \quad (1.21)$$

$$\frac{\partial h_j}{\partial t} + (\text{div}_\lambda u)_j + (\text{div}_\varphi v)_j = 0. \quad (1.22)$$

А именно, мы хотим получить условия, при которых существует дискретный аналог закона сохранения полной массы:

$$\frac{dm}{dt} = \sum_{i,j} \frac{\partial h_{i,j}}{\partial t} \cos \varphi_j \Delta \varphi_j \Delta \lambda_j = \sum_j \left\langle \frac{\partial h_j}{\partial t}, \hat{1}_j \right\rangle_j \cos \varphi_j \Delta \varphi_j = 0, \quad (1.23)$$

и дискретный аналог закона сохранения полной энергии:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} = & \sum_{j=1}^{N_\varphi} \left\langle \frac{\partial h_j}{\partial t}, h_j \right\rangle_j \Delta \varphi_j \cos \varphi_j + \sum_{j=1}^{N_\varphi} \left\langle \frac{\partial u_j}{\partial t}, u_j \right\rangle_j \Delta \varphi_j \cos \varphi_j + \\ & + \sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left\langle \frac{\partial v_{j+\frac{1}{2}}}{\partial t}, v_{j+\frac{1}{2}} \right\rangle_{j+\frac{1}{2}} \Delta \varphi_{j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} = 0, \end{aligned} \quad (1.24)$$

где $\langle a, b \rangle_j = \sum_{i=1}^{N_j^\lambda} a_i b_i \Delta \lambda_j$ и $\hat{1}_j$ – вектор, все компоненты которого равны единицам, размера $N_j^\lambda \times 1$. Мы используем уравнения мелкой воды с $g = 1$, $H = 1$, $a = 1$, чтобы уменьшить размеры выкладок, поскольку значения этих параметров влияют только на определение скалярных произведений и не будут влиять на вид ограничений для интерполяционных процедур.

Сохранение массы. Тенденция массы, связанная с меридиональной частью аппроксимации оператора дивергенции выражается как:

$$\sum_{i,j} (\operatorname{div}_\varphi v)_{i,j} \cos \varphi_j \Delta \varphi_j \Delta \lambda_j = \sum_j \langle (\operatorname{div}_\varphi v)_j, \hat{1}_j \rangle_j \cos \varphi_j \Delta \varphi_j. \quad (1.25)$$

Для наличия закона сохранения массы требуется, чтобы выражение (1.25) равнялось нулю для любой сеточной функции v . Подстановка общей формы аппроксимации меридиональной части дивергенции (1.15) приводит к следующему условию:

$$\sum_{j=1}^{N_\varphi} \left\langle W_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} - W_j^{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}}, \hat{1}_j \right\rangle_j = 0. \quad (1.26)$$

Можем воспользоваться тем фактом, что $(v \cos \varphi)$ равняется нулю на полюсах, и сгруппировать слагаемые следующим образом:

$$\sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left[\left\langle W_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}, \hat{1}_j \right\rangle_j - \left\langle W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}, \hat{1}_{j+1} \right\rangle_{j+1} \right] = 0. \quad (1.27)$$

Раскрывая определение скалярных произведений, можно перейти к векторно-матричной записи:

$$\sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left[\hat{1}_j^T W_j^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_j - \hat{1}_{j+1}^T W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_{j+1} \right] v_{j+\frac{1}{2}} = 0. \quad (1.28)$$

Покажем, что условие (1.27) выполняется для произвольной сеточной функции v тогда и только тогда, когда:

$$\hat{1}_j^T W_j^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_j = \hat{1}_{j+1}^T W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_{j+1}, \quad \forall j \in [1, N_\varphi - 1]. \quad (1.29)$$

Действительно, если условие (1.30) выполнено, то все слагаемые в уравнении (1.28) зануляются. Предположим теперь, что уравнение (1.28) выполняется. Подставляя в (1.28) тестовые сеточные функции вида $\tilde{v} = (0, \dots, \underbrace{1}_{k, p+\frac{1}{2}}, \dots, 0)$ получим

$$\hat{1}_p^T \left[W_p^{p+\frac{1}{2}} \right]_k \Delta \lambda_j - \hat{1}_{p+1}^T \left[W_{p+1}^{p+\frac{1}{2}} \right]_k \Delta \lambda_{p+1} = 0, \quad (1.30)$$

где $[]_k$ обозначает k -ый столбец матрицы. Подставляя тестовые функции со всевозможными значениями индексов k, p получим, что (1.30) выполняется. Таким образом показано, что условие (1.30) является необходимым и достаточным для сохранения массы при использовании общего вида аппроксимации меридиональной части оператора дивергенции (1.15).

Условие (1.30) означает, что абсолютное значение величины потока массы от переменных $v_{j+\frac{1}{2}}$ к переменным на широте φ_j должно быть равно абсолютному значению величины потока массы к переменным на широте φ_{j+1} . Естественный (но не единственный) способ удовлетворить это условие – потребовать:

$$\left\langle W_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}, \hat{1}_j \right\rangle_j \equiv \left\langle W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}, \hat{1}_{j+1} \right\rangle_{j+1} = \left\langle v_{j+\frac{1}{2}}, \hat{1}_{j+\frac{1}{2}} \right\rangle_{j+\frac{1}{2}}, \quad (1.31)$$

что приводит к следующему ограничению на интерполяционные матрицы:

$$\hat{1}_j^T W_j^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_j = \hat{1}_{j+1}^T W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_{j+1} = \hat{1}_{j+\frac{1}{2}}^T \Delta \lambda_{j+\frac{1}{2}}. \quad (1.32)$$

Это условие означает, что интерполяционная процедура должна быть консервативна в смысле скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot \rangle_j$. При использовании схем более высокого порядка аналогичные требования должны быть выполнены для всех интерполяционных матриц, входящих в аппроксимацию оператора дивергенции.

Сохранение энергии. Операторы дивергенции и градиента. Будем считать, что зональные аппроксимации $\text{grad}_\varphi, \text{div}_\lambda$ выбраны таким образом, чтобы не вносить вклад в тенденцию полной энергии. Тогда тенденция полной энергии, связанная с меридиональной частью дискретных операторов градиента и дивергенции выражается как:

$$- \sum_{j=1}^{N_\varphi} \left\langle (\text{div}_\varphi v)_j, h_j \right\rangle_j \Delta \varphi_j \cos \varphi_j - \sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left\langle (\text{grad}_\varphi h)_{j+\frac{1}{2}}, v_{j+\frac{1}{2}} \right\rangle_{j+\frac{1}{2}} \Delta \varphi_{j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}}. \quad (1.33)$$

Подставляя общий вид аппроксимации (1.14), (1.15) и группируя слагаемые, содержащие скалярные произведения векторов h_j и $v_{j+\frac{1}{2}}, v_{j-\frac{1}{2}}$, а также используя тот факт, что $(v \cos \varphi)$ равняется нулю на полюсах, мы получаем следующее

условие:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left[-\langle W_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}, h_j \rangle_j + \langle W_{j+\frac{1}{2}}^j h_j, v_{j+\frac{1}{2}} \rangle_{j+\frac{1}{2}} \right] \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} \\ & + \sum_{j=2}^{N_\varphi} \left[\langle W_j^{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}, h_j \rangle_j - \langle W_{j-\frac{1}{2}}^j h_j, v_{j-\frac{1}{2}} \rangle_{j-\frac{1}{2}} \right] \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}} = 0. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Перепишем это условие в матрично-векторном виде, подставив определения скалярных произведений:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_\varphi-1} h_j^T \left[\left(W_{j+\frac{1}{2}}^j \right)^T \Delta \lambda_{j+\frac{1}{2}} - W_j^{j+\frac{1}{2}} \Delta \lambda_j \right] v_{j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} \\ & \sum_{j=2}^{N_\varphi} h_j^T \left[\left(W_{j-\frac{1}{2}}^j \right)^T \Delta \lambda_{j-\frac{1}{2}} - W_j^{j-\frac{1}{2}} \Delta \lambda_j \right] v_{j-\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}} = 0. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Для выполнения этого условия для произвольных сеточных функций h и v необходимо и достаточно, чтобы выполнялось

$$\begin{aligned} W_{j+\frac{1}{2}}^j \Delta \lambda_{j+\frac{1}{2}} &= \left(W_j^{j+\frac{1}{2}} \right)^T \Delta \lambda_j, \quad j = 1 \dots N_\varphi - 1, \\ W_{j-\frac{1}{2}}^j \Delta \lambda_{j-\frac{1}{2}} &= \left(W_j^{j-\frac{1}{2}} \right)^T \Delta \lambda_j, \quad j = 2 \dots N_\varphi. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Действительно, если условия (1.36) выполняются, то каждое слагаемое в выражении (1.35) равняется нулю, так что (1.36) является достаточным условием. С другой стороны, если (1.35) выполняется, то подставляя в него тестовые функции вида

$$\tilde{h} = (0, \dots, \underbrace{1}_{i,j}, \dots, 0), \quad \tilde{v} = (0, \dots, \underbrace{1}_{k,j+\frac{1}{2}}, \dots, 0), \quad (1.37)$$

получаем

$$- \left[W_{j+\frac{1}{2}}^j \right]_{i,k} \Delta \lambda_{j+\frac{1}{2}} + \left[W_j^{j+\frac{1}{2}} \right]_{k,i} \Delta \lambda_j = 0, \quad (1.38)$$

где $[]_{i,k}$ обозначает (i,k) элемент матрицы. Подставляя тестовые функции со всевозможным набором индексов j, k, i , получаем выполнение условия (1.36).

Таким образом показано, что условие (1.36) является необходимым и достаточным для отсутствия тенденции полной энергии, связанной с дискретизацией меридиональной части операторов градиента и дивергенции общего вида (1.14), (1.15). Условие (1.36) может быть переписано в более компактном виде:

$$W_{j+\frac{1}{2}}^j \Delta \lambda_{j+\frac{1}{2}} = \left(W_j^{j+\frac{1}{2}} \right)^T \Delta \lambda_j, \quad j = 1, \frac{3}{2}, \dots, N_\varphi - 1, N_\varphi - \frac{1}{2}. \quad (1.39)$$

Сохранение энергии. Сила Кориолиса. Получим условия на интерполяционные матрицы, при которых аппроксимация силы Кориолиса в уравнениях на компоненты скорости не приводит к возникновению тенденции полной энергии системы. Для этого проанализируем вклад соответствующих слагаемых в дискретный закон сохранения полной энергии (1.24):

$$- \sum_{j=1}^{N_\varphi} \langle (fv)_j, u_j \rangle_j \Delta\varphi_j \cos \varphi_j + \sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left\langle (fu)_{j+\frac{1}{2}}, v_{j+\frac{1}{2}} \right\rangle_{j+\frac{1}{2}} \Delta\varphi_{j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}}. \quad (1.40)$$

Подставляя общий вид аппроксимации (1.18), (1.19) и группируя слагаемые, содержащие скалярные произведения векторов u_j и $v_{j+\frac{1}{2}}$, получаем:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_\varphi-1} \left[- \left\langle S_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}, (f \circ u)_j \right\rangle_j + \left\langle S_{j+\frac{1}{2}}^j (f \circ u)_j, v_{j+\frac{1}{2}} \right\rangle_{j+\frac{1}{2}} \right] \Delta\varphi_j \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} + \\ & \sum_{j=2}^{N_\varphi} \left[- \left\langle S_j^{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}, (f \circ u)_j \right\rangle_j + \left\langle S_{j-\frac{1}{2}}^j (f \circ u)_j, v_{j-\frac{1}{2}} \right\rangle_{j-\frac{1}{2}} \right] \Delta\varphi_j \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}} = 0. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Используя доказательство аналогичное доказательству из предыдущего раздела можно показать, что условие (1.41) выполняется для произвольных сеточных функций u, v тогда и только тогда, когда выполняется

$$S_{j+\frac{1}{2}}^j \Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = (S_j^{j+\frac{1}{2}})^T \Delta\lambda_j, j = 1, \frac{3}{2}, \dots, N_\varphi - 1, N_\varphi - \frac{1}{2}. \quad (1.42)$$

Сводка полученных ограничений. В таблице 1.1 приведены условия на интерполяционные матрицы, полученные выше. Все полученные условия являются необходимыми и достаточными. Примечательно, что условия сохранения энергии для интерполяционных матриц имеют один и тот же вид как для аппроксимации силы Кориолиса, так и для аппроксимации операторов градиента и дивергенции.

Таблица 1.1 — Краткое описание ограничений на интерполяционные матрицы, обеспечивающие свойства консервативности.

Сохранение массы	$\hat{1}_j^T W_j^{j+\frac{1}{2}} \Delta\lambda_j = \hat{1}_{j+1}^T W_{j+1}^{j+\frac{1}{2}} \Delta\lambda_{j+1}$
Сохранение энергии (дивергенция-градиент)	$W_{j+\frac{1}{2}}^j \Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = (W_j^{j+\frac{1}{2}})^T \Delta\lambda_j$
Сохранение энергии (сила Кориолиса)	$S_{j+\frac{1}{2}}^j \Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = (S_j^{j+\frac{1}{2}})^T \Delta\lambda_j$

1.3.2. Стационарные вычислительные моды

Одним из аргументов в пользу использования расчетной сетки с разнесением переменных типа "С" является отсутствие вычислительных стационарных мод гравитационных волн. Появление таких паразитных мод на неразнесенной сетке связано с возникновением в ядре дискретных горизонтальных операторов векторов, отличных от постоянных. При использовании разнесенной редуцированной сетки аналогичная ситуация может возникнуть из-за применения процедур одномерной интерполяции вдоль долготы. Например, если найдется сеточная функция \tilde{h}_j , такая что:

$$W_{j+\frac{1}{2}}^j \tilde{h}_j = \hat{0}_{j+\frac{1}{2}}, \quad W_{j-\frac{1}{2}}^j \tilde{h}_j = \hat{0}_{j-\frac{1}{2}}, \quad (1.43)$$

где $\hat{0}_j$ — вектор все компоненты которого равны нулям, то можно построить поле $\tilde{h} = (0 \dots \tilde{h}_j \dots 0)$, аппроксимация градиента которого равна нулевому вектору. Такой \tilde{h} в сочетании с любым бездивергентным полем ветра образует стационарную вычислительную моду системы. Амплитуда этой моды может неограниченно расти из-за наличия ненулевой проекции ошибок округления или внешних возмущающих воздействий в правых частях уравнений. При этом возможность выполнения условия (1.43) зависит не только от выбора процедуры интерполяции, но и от алгоритма построения сетки. Если, например, сетка построена таким образом, что:

$$\exists j : N_{j-\frac{1}{2}}^\lambda = N_{j+\frac{1}{2}}^\lambda < N_j^\lambda, \quad (1.44)$$

тогда отсюда следует, что: $W_{j+\frac{1}{2}}^j \equiv W_{j-\frac{1}{2}}^j$ и $Ker(W_{j+\frac{1}{2}}^j) = Ker(W_{j-\frac{1}{2}}^j)$. Более того, $dim(Ker(W_{j+\frac{1}{2}}^j)) > 0$, так как $N_{j+\frac{1}{2}}^\lambda < N_j^\lambda$. Таким образом (1.43) выполняется независимо от используемой процедуры интерполяции. Если предположить, что сетка построена таким образом, что в ней нет локальных экстремумов количества узлов, то для отсутствия вычислительных мод связанных с интерполяцией естественным будет потребовать, чтобы ядро оператора интерполяции с более грубой на более мелкую сетку было пустым множеством.

1.3.3. Построение интерполяционных процедур

В предыдущем разделе был получен ряд условий, которым должны соответствовать процедуры интерполяции для построения численных схем, сохраняющих массу и энергию системы. Однако полученные условия не являются конструктивными, то есть они не дают указаний о том, как такие интерполяционные процедуры могут быть построены. В данной главе рассматривается один из возможных подходов к построению процедуры интерполяции, который, с одной стороны, описывает довольно широкий класс интерполяционных схем, с другой стороны, позволяет строить интерполяционные схемы, обладающие свойствами, полученными в предыдущем разделе.

1.3.3.1. Общая схема

Рассмотрим задачу одномерной интерполяции значений сеточной функции между двумя равномерными сетками в периодической области:

$$\begin{aligned} x_i^a &= x_0^a + (i - 1)\Delta x_a, i = 1 \dots n_a, \Delta x_a = \frac{2\pi}{n_a}, \\ x_i^b &= x_0^b + (i - 1)\Delta x_b, i = 1 \dots n_b, \Delta x_b = \frac{2\pi}{n_b}. \end{aligned}$$

Для этого определим операторы продолжения (операторы перехода от сеточных функций к функциям непрерывного аргумента):

$$P^a q^a = \sum_{i=1}^{n_a} q_i^a \psi_i^a(x), P^b q^b = \sum_{i=1}^{n_b} q_i^b \psi_i^b(x),$$

где q^a, q^b – сеточные функции, определенные в узлах сетки x^a, x^b соответственно, $\psi_i^a(x), \psi_i^b(x)$ – базисные функции операторов продолжения.

Также рассмотрим операторы ограничения (операторы перехода от функций непрерывного аргумента к сеточным функциям):

$$(R^a q)_i = \frac{\int_0^{2\pi} q(x) \theta_i^a(x) dx}{\int_0^{2\pi} \theta_i^a(x) dx}, (R^b q)_i = \frac{\int_0^{2\pi} q(x) \theta_i^b(x) dx}{\int_0^{2\pi} \theta_i^b(x) dx}.$$

Функции $\theta_i^a(x), \theta_i^b(x)$ будем называть базисными функциями оператора ограничения.

Так как мы работаем с равномерными сетками в периодической области, будем считать, что все базисные функции получаются трансляцией некоторой исходной функции:

$$\psi_i(x) = \psi(x - i\Delta x), \theta_i(x) = \theta(x - i\Delta x). \quad (1.45)$$

Теперь мы можем определить оператор интерполяции между сетками как композицию операторов продолжения и ограничения:

$$\tilde{q}^b = I_a^b q^a \equiv R^b P^a q^a, \tilde{q}^a = I_b^a q^b \equiv R^a P^b q^b \quad (1.46)$$

Определенный таким образом оператор позволяет строить различные интерполяционные схемы за счет выбора конкретных семейств базисных функций оператора ограничения и продолжения. Матричное представление оператора интерполяции:

$$\{I_a^b\}_{i,j} = \frac{\int_0^{2\pi} \psi_j^a(x) \theta_i^b(x) dx}{\int_0^{2\pi} \theta_i^b(x) dx}.$$

Определив общий вид интерполяционных процедур, мы можем получить ограничения на выбор базисных функций, необходимых для выполнения условий на интерполяционные матрицы (таблица 1.1), полученных в предыдущем разделе.

1.3.3.2. Сохранение массы

Перепишем условие (1.32) с использованием обозначений, определенных в данном разделе:

$$\langle I_a^b q^a, \hat{1}_b \rangle_b = \langle q^a, \hat{1}_a \rangle_a. \quad (1.47)$$

Покажем, что для выполнения этого условия достаточно, чтобы базисные функции операторов ограничения и продолжения являлись разбиением единицы:

$$\sum_i \psi_i^a(x) = 1, \sum_i \theta_i^b(x) = 1, \forall x. \quad (1.48)$$

Действительно, пользуясь условиями (1.45) и (1.48), легко показать, что для базисных функций выполняется

$$\int_0^{2\pi} \psi_i^a(x) dx = \Delta x_a, \quad \int_0^{2\pi} \theta_i^b(x) dx = \Delta x_b. \quad (1.49)$$

Тогда

$$\langle I_a^b q^a, \hat{1}_b \rangle_b = \Delta x_b \sum_{i,j} \frac{\int_0^{2\pi} \theta_i^b(x) \psi_j^a(x) q_j^a dx}{\int_0^{2\pi} \theta_i^b(x) dx} = \quad (1.50)$$

$$= \Delta x_b \sum_j q_j^a \frac{\int_0^{2\pi} (\sum_i \theta_i^b(x)) \psi_j^a(x) dx}{\Delta x_b} = \sum_j q_j^a \int_0^{2\pi} \psi_j^a(x) dx = \quad (1.51)$$

$$= \sum_j q_j^a \Delta x_a \equiv \langle q^a, \hat{1}_a \rangle_a. \quad (1.52)$$

1.3.3.3. Сохранение энергии

Условия (1.39), (1.42) для интерполяционной процедуры вида (1.46) записываются как

$$I_a^b \Delta x_b = (I_b^a)^T \Delta x_a. \quad (1.53)$$

То есть для элементов интерполяционной матрицы должно выполняться:

$$\frac{\int_0^{2\pi} \psi_i^a(x) \theta_j^b(x) dx}{\int_0^{2\pi} \theta_j^b(x) dx} \Delta x_b = \frac{\int_0^{2\pi} \psi_j^b(x) \theta_i^a(x) dx}{\int_0^{2\pi} \theta_i^a(x) dx} \Delta x_a.$$

Данное условие выполняется, если потребовать выполнения (1.48) и

$$\theta_i^a(x) = \psi_i^a(x), \quad \theta_j^b(x) = \psi_j^b(x). \quad (1.54)$$

То есть для операторов продолжения и ограничения должен использоваться один и тот же набор базисных функций.

1.3.3.4. Примеры интерполяционных процедур

Рассмотрим некоторые примеры построения интерполяционных процедур, основанных на предложенной в прошлом разделе схеме. Для простоты будем

рассматривать построение интерполяционных процедур на основе применения хорошо известных кусочно-полиномиальных базисных функций Лагранжа. Например, кусочно-квадратичные базисные функции с использованием нормализованных координат $t = \frac{x-x_i}{\Delta x}$ могут быть записаны в следующем виде:

$$\psi_i(t) = \begin{cases} (1 - |t|)(1 + |t|), & |t| \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{2}(1 - |t|)(2 - |t|), & \frac{1}{2} < |t| \leq \frac{3}{2}, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1.55)$$

а кусочно-кубические базисные функции в виде

$$\psi_i(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 - |t|)(1 + |t|)(2 - |t|), & |t| \leq 1 \\ \frac{1}{6}(1 - |t|)(2 - |t|)(3 - |t|), & 1 < |t| \leq 2, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (1.56)$$

В первую очередь заметим, что применение интерполяционных базисных функций Лагранжа в качестве базисных функций оператора продолжения и дельта-функций Дирака в качестве базисных функций оператора ограничения приводит к обычной кусочной-полиномиальной процедуре интерполяции. Однако использование дельта-функций в качестве базисных функций оператора ограничения приводит к невыполнению условий (1.47), (1.54). Так что в общем случае при использовании такой интерполяционной процедуры для дискретизации операторов на редуцированной сетке с разнесением переменных можно ожидать отсутствия выполнения законов сохранения массы и энергии для рассматриваемой системы линеаризованных уравнений мелкой воды. Для восстановления свойства сохранения массы можно, например, использовать базис оператора ограничения, состоящий из кусочно-постоянных функций

$$\psi_i(t) = \begin{cases} 1, & |t| \leq \frac{1}{2}, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (1.57)$$

Для выполнения закона сохранения энергии требуется использовать одни и те же базисные функции как для операторов продолжения, так и для операторов ограничения. Стоит отметить, что это приведет к увеличению размера пространственного шаблона интерполяционной процедуры (по сравнению с использованием интерполяции Лагранжа).

Использование кусочно-полиномиальных базисных функций для операторов продолжения и ограничения, вероятно, не оптимально для построения схем на редуцированной широтно-долготной сетке. В работе [41] показано, что желательным является использовать процедуры интерполяции и дифференцирования вдоль зонального направления, которые точны для функций $\sin m\lambda$, $\cos m\lambda$ с $m = \{0,1,2\}$. Построение интерполяционных процедур, обладающих такими свойствами, в рамках предложенного подхода возможно, если в качестве базисных функций взять кусочно-тригонометрические функции [41; 52].

Еще одним возможным вариантом интерполяционной процедуры является интерполяция Фурье. Основным недостатком этого метода является нелокальность этой процедуры (вычисления включают значения сеточной функции вдоль всего круга фиксированной широты), что отрицательно сказывается на эффективности параллельной реализации этого метода. Отметим, что дискретизация операторов, основанная на Фурье-интерполяции, обладает всеми указанными выше желательными свойствами (таблица 1.1) и гарантирует отсутствие вычислительных стационарных мод, связанных с нетривиальным ядром оператора интерполяции от более грубой к более мелкой сетке в дискретных операторах дивергенции и градиента. На данный момент аппроксимации операторов на редуцированной сетке, основанные на интерполяции Фурье, используются в глобальной гидростатической модели атмосферы ПЛАВ [4] (редуцированная неразнесенная Z-сетка).

1.3.4. Численные эксперименты

В этом разделе приводятся результаты численных экспериментов, которые были проведены для проверки и исследования свойств описанных выше дискретизаций для численного решения линеаризованных уравнений мелкой воды на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных. В рамках данных экспериментов исследуются дисперсионные свойства распространения волн, влияние степени редукции сетки на точность решений и проверяется выполнение законов сохранения для схем, основанных на применении интерполяционных процедур, описанных выше.

1.3.4.1. Построение редуцированной сетки

На сегодняшний день известно довольно большое количество методов построения редуцированной широтно-долготной сетки. Один из первых вариантов, предложенный для использования в рамках конечно-разностной модели атмосферы, был представлен в работе [15], где количество узлов сетки уменьшается пропорционально косинусу широты, при этом величина шага сетки в километрах вдоль зонального и меридионального направления равны друг другу. Другой вариант, основанный на минимизации ошибки интерполяции некоторой тестовой функции, был предложен в работе [53]. Этот алгоритм позволяет строить редуцированную сетку с переменным разрешением по широте и заданным максимальным коэффициентом анизотропии и был протестирован в рамках полунявной полулагранжевой модели мелкой воды [54] и глобальной модели атмосферы ПЛАВ [4]. В статье [55] предлагается рекурсивный алгоритм деления сферы на прямоугольные области одинаковой площади. В работе [56] представлен общий подход для разбиения сферы на прямоугольные области с возможностью управления формой этих прямоугольников (соотношение сторон, минимальное/максимальное отношение площадей).

В рамках данной работы мы фокусируемся на изучении свойств предложенных разностных схем, а не на оптимизации точности, связанной с выбором конкретного алгоритма построения редуцированной сетки. Поэтому мы будем использовать упрощенный подход для построения редуцированной сетки. Будут использоваться сетки с уменьшением количества точек по долготе от экватора к полюсу, начиная с $2N_\varphi$ до некоторого заданного значения $\lceil N_p \rceil$ согласно следующему выражению:

$$N_j^\lambda = \left\lceil N_p + (2N_\varphi - N_p) \frac{\cos \varphi_j - \cos \varphi_1}{\cos \varphi_{N_\varphi/2} - \cos \varphi_1} \right\rceil, \quad j = 1.. \frac{N_\varphi}{2}. \quad (1.58)$$

Здесь $\lceil x \rceil$ – функция округления в большую сторону, возвращающая наименьшее целое число, большее или равное x . Выбор $N_p = 2N_\varphi \cos \varphi_1$ в (1.58) приводит к $N_j^\lambda = \lceil 2N_\varphi \cos \varphi_j \rceil$, что является определением редуцированной сетки Курихары [15]. В численных экспериментах мы будем использовать $N_p = \alpha 2N_\varphi$, где $\alpha \in (0,1]$ – параметр редукции сетки. Величину $1 - \alpha$ будем обозначать как степень редукции сетки. Количество точек вдоль полуполных широт получается усреднением числа точек на двух соседних целых широтах

$$N_{j+1/2}^\lambda = \left\lceil \frac{N_{j+1}^\lambda + N_j^\lambda}{2} \right\rceil. \quad (1.59)$$

Параметры сеток, которые будут использоваться в численных экспериментах, приведены в таблице 1.2. Здесь $DOFs$ — это число степеней свободы в линейаризованной модели мелкой воды (u, v, h) , а "максимальная анизотропия" определяется как $\max_j \frac{\Delta\varphi_j}{\Delta\lambda_j \cos \varphi_j}$.

Таблица 1.2 — Параметры сеток, используемых в численных экспериментах.

N_φ	α	DOFs	N_1^λ	максимальная анизотропия
16	1	1504	32	10.2
	1/2	1236	16	5.1
	1/4	1086	8	2.56
	1/8	1022	4	1.28
32	1	6080	64	20.4
	1/2	4992	32	10.2
	1/4	4420	16	5.1
	1/8	4132	8	2.55
64	1	24448	128	40.7
	1/2	20042	64	20.4
	1/4	17798	32	10.2
	1/8	16668	16	5.1
128	1	98048	256	81.5
	1/2	80304	128	40.7
	1/4	71338	64	20.4
	1/8	66858	32	10.2

1.3.4.2. Описание разностных схем

Для численных экспериментов рассматриваются следующие варианты дискретизации. Все используемые дискретизации основаны на общем виде разностных представленных в разделе 1.3 и отличаются друг от друга только используемыми интерполяционными процедурами. Первая схема построена с использованием кусочно-кубической Лагранжевой интерполяции для всех операторов. Как обсуждалось выше, применение такой интерполяционной процедуры приводит к отсутствию законов сохранения массы и полной энергии, поэтому эту схемы в дальнейшем будем обозначать "non-cons". Второй вариант

отличается только построением дискретизации оператора дивергенции. Здесь при построении интерполяционной процедуры в качестве базисных функций оператора продолжения используется кусочно-кубические базисные функции Лагранжа (1.56), а в качестве базисных функций оператора ограничения – кусочно-постоянные функции (1.57). Такой выбор обеспечивает наличие закона сохранения массы. Этот вариант дискретизации будем обозначать как "mass-cons". Последний вариант основан на использовании кусочно-квадратичных (1.55) базисных функций Лагранжа как для операторов продолжения, так и для операторов ограничения. Эта схема консервативна по энергии и массе и обозначается как "En-cons". Кроме того, для целей сравнения мы также будем использовать стандартные схемы второго порядка на регулярной разнесенной и неразнесенной широтно-долготной сетке, которые будем обозначать как "regular C" и "regular A". Обратите внимание, что схемы "regular C" и "regular A" сохраняют массу и полную энергию.

1.3.4.3. Сходимость дискретного оператора Лапласа

В данном разделе рассматривается сходимость дискретного оператора Лапласа $L = (\text{div}_\lambda \text{grad}_\lambda + \text{div}_\varphi \text{grad}_\varphi)$. Этот тест предоставляет базовую информацию о точности дискретных операторов градиента и дивергенции а также является хорошей первичной проверкой корректности предлагаемого метода построения схем. Сходимость дискретного оператора Лапласа исследуется на тестовой функции – сферической гармонике $Y_3^{-3} = \sin 3\lambda \cos^3 \varphi$, являющейся собственной функцией для горизонтального оператора Лапласа на сфере. Вычисляются относительные l_2 и l_∞ нормы ошибок на последовательности сеток, определенной в таблице 1.2. l_2 и l_∞ нормы сеточных функций вычисляются по формулам

$$l_2(f) = \left(\sum_{j=1}^{N_\varphi} \sum_{i=1}^{N_\lambda} f_{i,j}^2 \cos \varphi_j \Delta \lambda_j \Delta \varphi_j \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.60)$$

$$l_\infty = \max_{i,j} |f_{i,j}|. \quad (1.61)$$

Результаты расчетов приведены на рисунке 1.2. Для всех схем сходимость по относительной норме ошибки l_2 близка ко второму порядку, а по относительной норме ошибки l_∞ – к первому порядку. Таким образом, для заданной тестовой функции порядок аппроксимации полученных схем совпадает с ожидаемым, а относительные нормы ошибок близки к нормам ошибок для схемы на регулярной сетке.

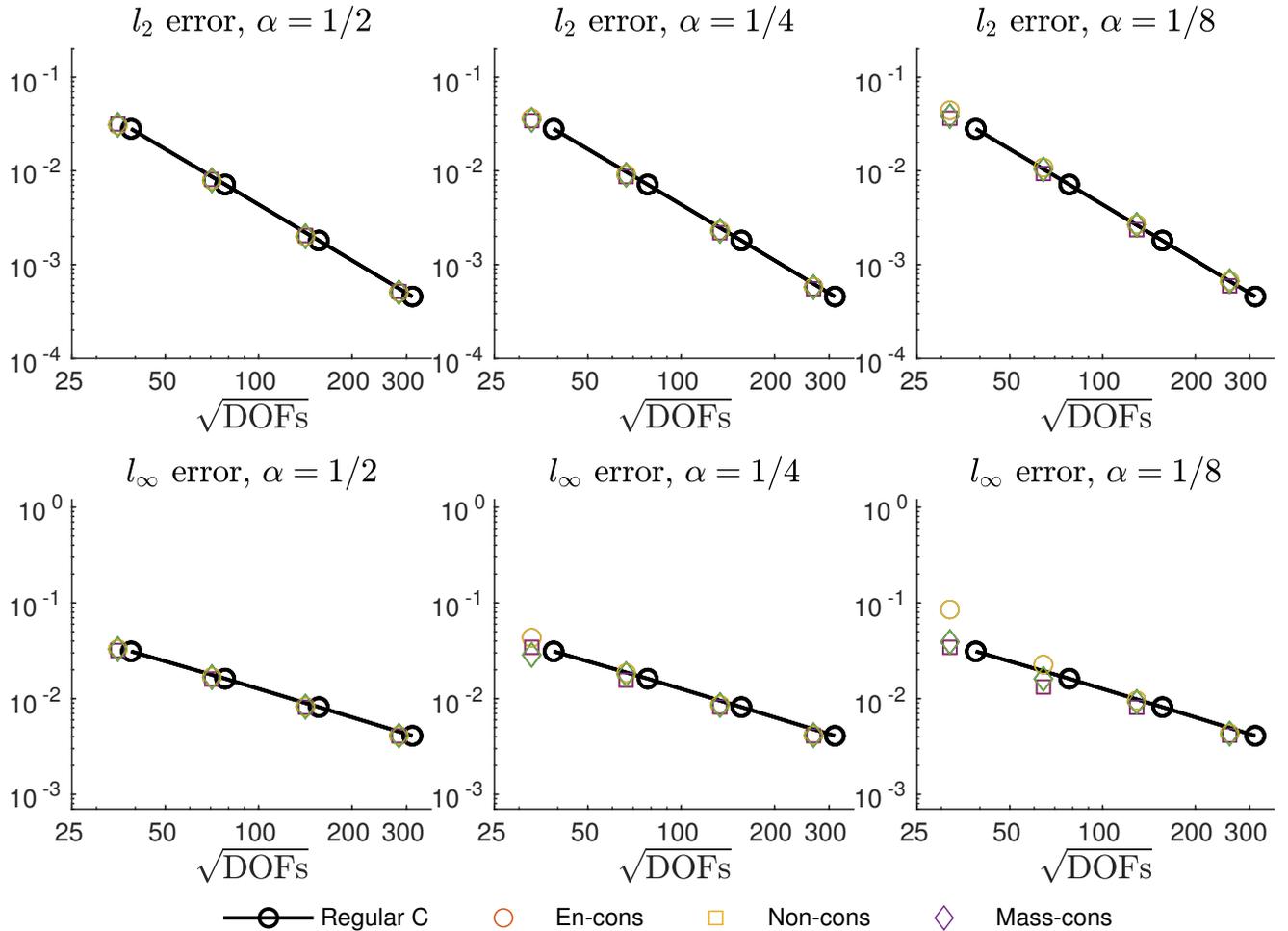


Рисунок 1.2 — Относительные нормы ошибок приближенного вычисления оператора Лапласа от тестовой функции $Y_3^{-3} = \sin 3\lambda \cos^3 \varphi$ для различных вариантов схем.

1.3.4.4. Анализ дисперсионных характеристик численных гравитационных волн

В этом разделе рассматриваются свойства распространения гравитационных волн при использовании схем, описанных выше. Одними из основных аргументов в пользу применения сетки с разнесением переменных типа "С" являются отсутствие ложных численных стационарных мод гравитационных волн и более точное воспроизведение дисперсионной характеристики этих волн (монотонное поведение, более точные значения в области крупномасштабных гармоник). Как уже было отмечено выше, предложенный подход для построения редуцированной широтно-долготной сетки с разнесением переменных не является прямым обобщением разнесения типа "С" для сеток с конформными ячейками. Кроме этого, дискретизация горизонтальных операторов на такой сетке содержит интерполяционные процедуры, которые могут приводить к возникновению нефизических стационарных мод, а также ухудшать воспроизведение дисперсионной характеристики численных гравитационных волн. Поэтому требуется дополнительная проверка того, что предложенный вариант сетки с разнесением переменных обладает положительными свойствами, присущими стандартным сеткам с разнесением переменных типа "С".

В отсутствие силы Кориолиса решения линеаризованных уравнений мелкой воды полностью определяются собственными функциями и собственными значениями оператор Лапласа. Поэтому изучение дисперсионных характеристик численных гравитационных волн мы начнем с прямого вычисления спектра матрицы дискретного оператора Лапласа $L = (\text{div}_\lambda \text{grad}_\lambda + \text{div}_\varphi \text{grad}_\varphi)$ для конфигураций сеток с $N_\varphi = 16$ и для различных вариантов схем. Эти расчеты показывают отсутствие дополнительных стационарных мод (нулевых собственных значений) для всех протестированных схем. Единственное нулевое собственное значение соответствует постоянному собственному вектору. Все остальные собственные значения являются отрицательными вещественными числами, что необходимо для устойчивого интегрирования по времени. На рисунке 1.3 показаны собственные значения (кроме первого нулевого собственного значения) схемы "Regular C" и схемы "En-cons" на сетках с разными значениями величины α , определяющей степень редукции сетки.

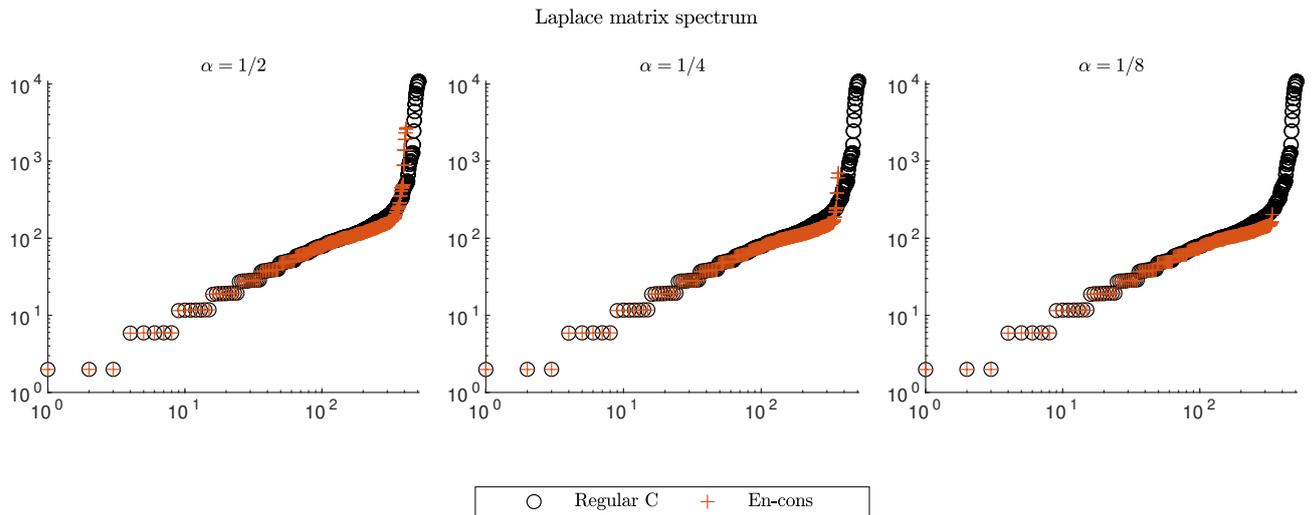


Рисунок 1.3 — Собственные значения матрицы дискретного оператора Лапласа при использовании схемы "En-cons" и "Regular C" при различных параметрах редукции сетки α , взятые с противоположенным знаком и отсортированные в порядке возрастания.

К сожалению, вычисление собственных значений и собственных векторов матрицы дискретного оператора Лапласа не позволяет напрямую получить информацию о дисперсионной характеристике гравитационных волн. Проблема заключается в том, что нам априори неизвестен пространственный масштаб полученных собственных векторов. Такая проблема не возникает в случае более простых расчетных областей и геометрий. Например, в случае бипериодической плоскости с равномерной сеткой легко показать, что собственными векторами линейных дифференциальных операторов являются проекции на сетку функций вида $e^{ik_x x} e^{ik_y y}$, для которых пространственный масштаб определяется значениями волновых чисел k_x, k_y . Можно предположить, что собственными векторами для дискретного оператора Лапласа на сфере являются проекции сферических гармоник на сетку, однако это не верно даже для случая регулярной широтно-долготной сетки.

Таким образом, возникает задача оценки пространственного масштаба произвольных сеточных функций на сфере. Однако дать корректное определение пространственного масштаба для сеточных функций само по себе является сложной задачей, поэтому в этой работе предлагается использовать другой подход. Вместо того, чтобы пытаться оценить пространственный масштаб собственных векторов дискретного оператора Лапласа, предлагается оценить "среднее собственное значение" для сеточных функций с заранее известным

пространственным масштабом – сферических гармоник Y_l^m , для которых пространственный масштаб определяется меридиональным волновым числом l . Для оценки среднего собственного значения матрицы L для заданной сеточной функции q предлагается использовать следующее соотношение:

$$\bar{\lambda}^{-2} = \frac{(Lq, Lq)}{(q, q)} = \frac{(L^*Lq, q)}{(q, q)}, \quad (1.62)$$

где $(a, b) = \sum_{i,j} a_{i,j} b_{i,j} \Delta\lambda_j \cos \varphi_j \Delta\varphi_j$ и L^* определяется как $(La, b) = (a, L^*b)$. Так как матрица L^*L является симметричной в терминах дискретного скалярного произведения (\cdot, \cdot) , существует ортонормированный базис из собственных векторов этой матрицы z_j и

$$\frac{(L^*Lq, q)}{(q, q)} = \frac{(\sum_k \lambda_k^2 \hat{q}_k z_k, \sum_k \hat{q}_k z_k)}{(\sum_k \hat{q}_k z_k, \sum_k \hat{q}_k z_k)} = \frac{\sum_k \lambda_k^2 |\hat{q}_k|^2}{\sum_k |\hat{q}_k|^2}, \quad (1.63)$$

где \hat{q}_k – коэффициент разложения по базисным векторам. Величина $\bar{\lambda}^{-2}$ может рассматриваться как отношение Рэлея для матрицы L^*L и вектора q , а также очень похоже на "среднее спектральное число", определенное в работе [57]. Таким образом, можно построить аналог дисперсионной характеристики оператора L , оценивая значения $\bar{\lambda}$ для проекций сферических гармоник Y_l^m на сетку:

$$\bar{\lambda}_{l,m} = \sqrt{\frac{(LY_l^m, LY_l^m)}{(Y_l^m, Y_l^m)}}, \quad l = 0 \dots N_\varphi - 1, \quad m = -l, \dots, l. \quad (1.64)$$

Поскольку Y_l^m имеет один и тот же масштаб при фиксированном значении l , воспользуемся дополнительным усреднением по m :

$$\bar{\lambda}_l = \frac{1}{2m+1} \sum_{m=-l}^l \lambda_{lm}, \quad l = 0 \dots N_\varphi - 1. \quad (1.65)$$

На рисунке 1.4 показаны рассчитанные значения $\bar{\lambda}_l$ для всех схем на сетках с $N_\varphi = 16$. Все протестированные схемы демонстрируют зависимость, достаточно близкую к результатам на регулярной С-сетке. Для регулярной широтно-долготной сетки без разнесения переменных наблюдается немонотонное поведение данной характеристики. Начиная с некоторого момента при увеличении пространственного масштаба, происходит уменьшение величины $\bar{\lambda}_l$, что является характерным поведением численных схем при использовании неразнесенной

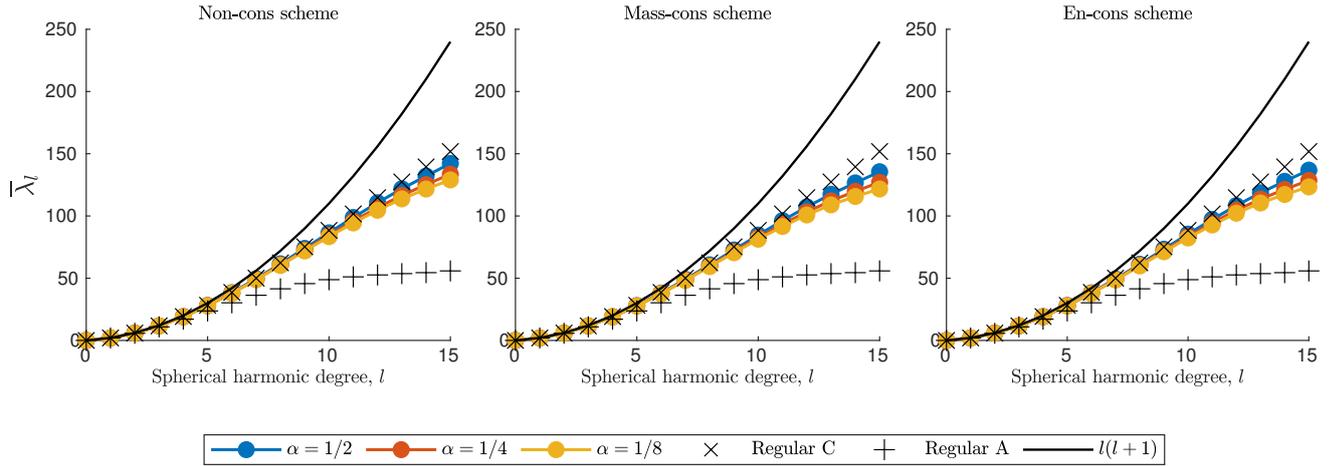


Рисунок 1.4 — Сравнение зависимости значения величины $\bar{\lambda}_l$ от степени сферических функций l для различных разностных схем.

сетки и еще раз доказывает корректность предложенного подхода для оценки дисперсионной характеристики. Мы также приводим значения $\bar{\lambda}_{l,m}$ на рисунке 1.5, чтобы исследовать изменчивость этой характеристики в зависимости от m . Для удобства на этом рисунке показано сравнение разностных схем на регулярной широтно-долготной сетке со схемой "En-cons" при использовании $\alpha = 1/2$. Результаты для остальных схем на редуцированной сетке качественно совпадают с представленной на рисунке 1.5 зависимостью. Из рисунка видно, что результаты расчета величины $\bar{\lambda}_{l,m}$ для схемы на редуцированной сетке довольно близки к результатам схемы на регулярной сетке с разнесением переменных и не наблюдаются признаки наличия дополнительных стационарных мод.

1.3.4.5. Анализ аппроксимации силы Кориолиса

В этом разделе рассматривается вопрос влияния применения редуцированной сетки с разнесением переменных на аппроксимацию силы Кориолиса и дисперсионной характеристики инерционно-гравитационным.

Анализ производится с использованием так называемого приближения f-сферы (сфера с постоянным значением параметра Кориолиса). Использование модели f-сферы для линейных уравнений мелкой воды позволяет получить аналитическое дисперсионное уравнение для инерционно-гравитационных волн:

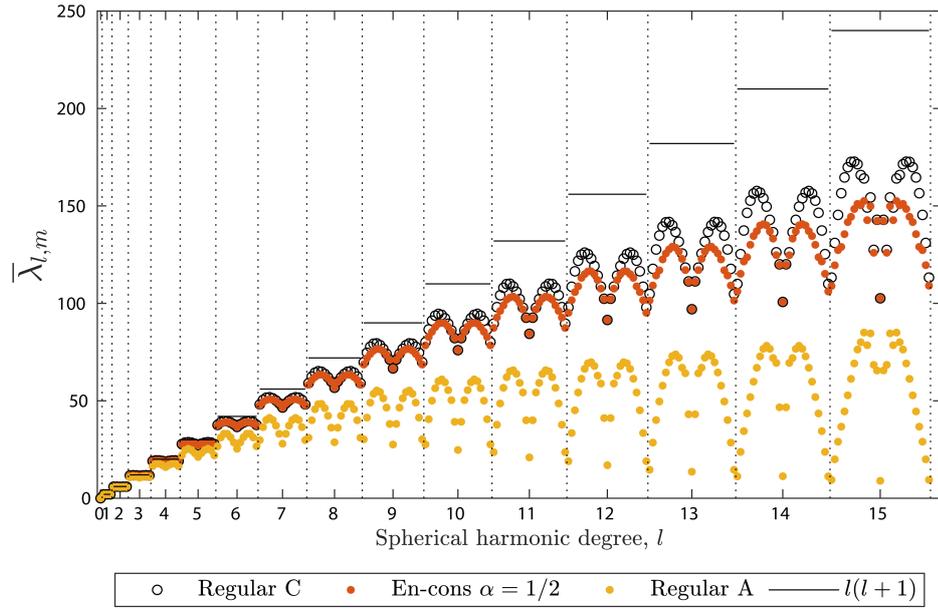


Рисунок 1.5 — Сравнение зависимости величины $\bar{\lambda}_{l,m}$ для схем regular C, regular A и схемы en-cons. Вертикальные пунктирные линии обозначают интерфейсы между последовательными значениями величины l . Значение величины m меняется от $-l$ до l между интерфейсами.

$$\omega(\omega^2 - f^2 - l(l+1)gH/a^2) = 0, \quad (1.66)$$

и аналитическое соотношение для членов уравнений, описывающих действие силы Кориолиса на двумерные векторные сферические гармоники:

$$f\mathbf{k} \times \Phi_l^m = -f\Psi_l^m, \quad (1.67)$$

где Φ_l^m — бездивергентные векторные сферические гармоники, а Ψ_l^m — безвихревые векторные сферические гармоники. Поэтому можно использовать Φ_l^m , Ψ_l^m в качестве тестовых функций для оценки аналога дискретной дисперсионной характеристики:

$$\bar{\lambda}_{l,m} = \sqrt{\frac{(C\Phi_l^m, C\Phi_l^m)}{(\Psi_l^m, \Psi_l^m)}}, \quad l = 0 \dots N_\varphi - 1, \quad m = -l \dots l. \quad (1.68)$$

$$\bar{\lambda}_l = \frac{1}{2m+1} \sum_{m=-l}^l \bar{\lambda}_{l,m}, \quad l = 0 \dots N_\varphi - 1. \quad (1.69)$$

Здесь C — матрица дискретного оператора силы Кориолиса. Так как для аппроксимации силы Кориолиса даже в случае регулярной сетки используется интерполяция значений сеточных функций между u и v узлами сетки, следует ожидать монотонного уменьшения значений $\bar{\lambda}_l$ с увеличением значения l . Вопрос заключается в том, приводит ли нерегулярная структура редуцированной сетки с разнесением переменных и связанное с ней изменение интерполяционных процедур к дополнительному искажению этой характеристики. На рисунке 1.6 показаны рассчитанные значения $\bar{\lambda}_l/f$ на сетках с $N_\varphi = 16$. Видно, что все рассматриваемые схемы показывают похожую зависимость. Аналогичная картина наблюдается и для значений $\bar{\lambda}_{l,m}$ (не показано). Таким образом, есть основания полагать, что применение редуцированной сетки с разнесением переменных не вносит дополнительного отрицательного влияния на дисперсионные характеристики инерционно-гравитационных волн.

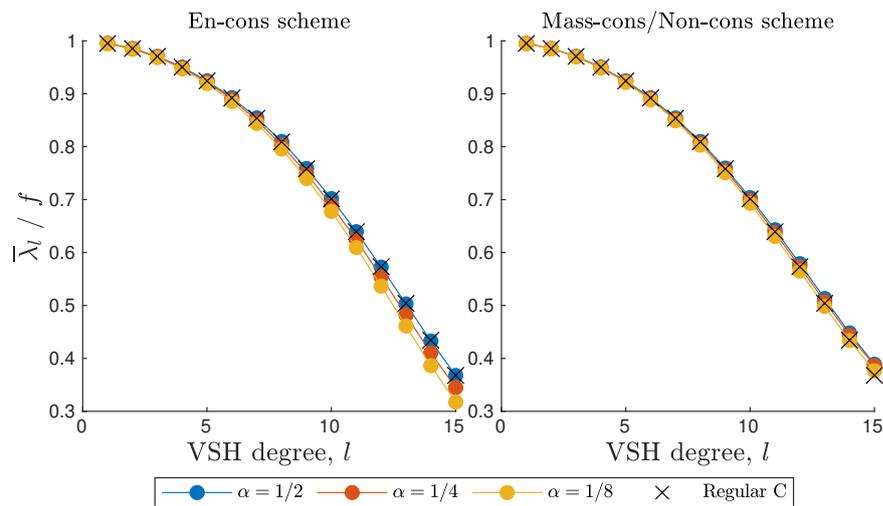


Рисунок 1.6 — Значения величины $\bar{\lambda}_l/f$ в зависимости от степени сферической гармоники l для различных схем и сеток с различным значением параметра α .

1.3.4.6. Геострофически сбалансированное течение

Глобальный стационарный зональный геострофический поток (линеаризованная версия теста 2 из [43]) рассматривается для проверки заявленных свойств сохранения рассматриваемых дискретизаций. Данный тест представляет собой

геострофически сбалансированное устойчивое течение. Начальное состояние задается

$$u = u_0 (\cos \varphi \cos \gamma + \cos \lambda \sin \varphi \sin \gamma), \quad (1.70)$$

$$v = -u_0 \sin \lambda \sin \gamma, \quad (1.71)$$

$$gh = gH - a\Omega u_0 (-\cos \lambda \cos \varphi \sin \gamma + \sin \varphi \cos \gamma)^2. \quad (1.72)$$

Здесь $\Omega = 7.292 \times 10^{-5} \text{c}^{-1}$ — угловая скорость Земли, $u_0 = \frac{2\pi a}{12 \text{ days}} \text{м/с}$ — максимальная скорость потока, $gH = 2,94 \times 10^4 \text{м}^2/\text{с}^2$ — максимальная геопотенциальная высота, а $\gamma = \pi/4$ — угол между географической полярной осью и полярной осью повернутой системы координат. Поскольку начальное состояние геострофически сбалансировано, точное решение задачи совпадает с начальными условиями в каждый момент времени.

Эксперименты проводятся на сетках с $N_\varphi = 128$. Мы используем сохраняющую энергию схему Кранка-Николсон для дискретизации по времени. Задача Гельмгольца решается с помощью метода бисопряженных стабилизированных градиентов (BiCGstab) [58].

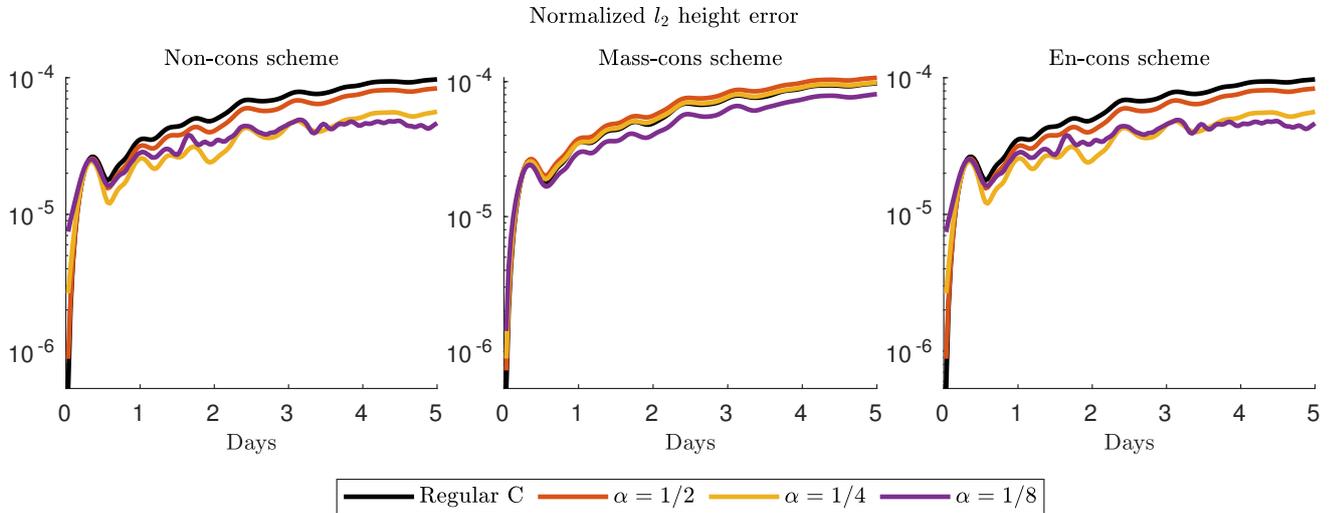


Рисунок 1.7 — Эволюция во времени относительной l_2 нормы ошибки высоты уровня жидкости для разных схем. Тест «геострофически сбалансированное течение».

На рисунке 1.7 представлена эволюция во времени относительной l_2 нормы ошибки высоты уровня жидкости для различных разностных схем и величины степени редукции сетки. В целом для всех схем наблюдается сходный характер роста и величины нормы ошибок с основным отличием в начальных

значениях ошибки, которые увеличиваются с ростом степени редукции сетки. Кроме того, эксперименты с конфигурациями сеток из таблицы 1.2 демонстрируют сходимость l_2 нормы ошибки высоты уровня жидкости со вторым порядком для всех рассматриваемых схем. В то же время наблюдается значительный рост l_∞ нормы ошибки поля дивергенции скорости ветра при увеличении степени редукции сетки. Эта ошибка локализована на широтах вблизи полюсов и является проявлением так называемой проблемы полюса редуцированной сетки [41; 59]. Анализ этой проблемы, представленный в работе [41], показал, что ее можно избежать, если процедуры дифференцирования и интерполяции вдоль зонального направления точны для функций $\cos m\lambda$, $\sin m\lambda$ с $m = \{0,1,2\}$. Как уже упоминалось в разделе 1.3.3.4, построение таких интерполяционных процедур возможно в рамках представленного подхода.

Рисунки 1.8 и 1.9 показывают эволюцию во времени нормированного значения абсолютной погрешности массы и энергии. Эти графики подтверждают наличие у рассматриваемых схем заявленных свойств сохранения. Интересно, что схема, сохраняющая массу, показывает большую ошибку сохранения энергии, чем неконсервативная схема.

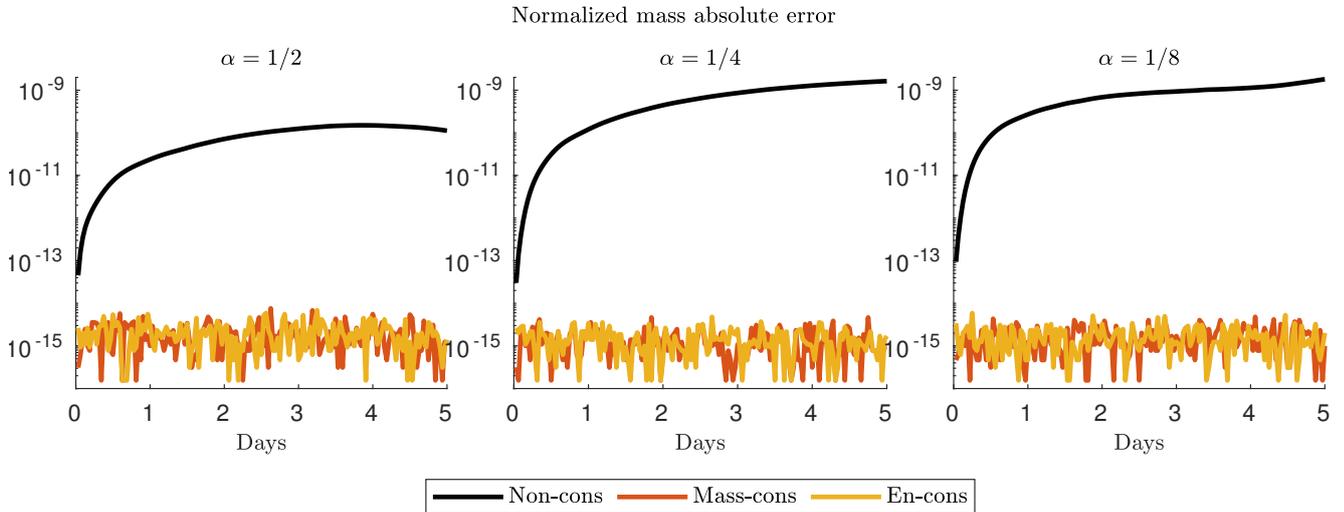


Рисунок 1.8 — Эволюция во времени относительной ошибки сохранения массы для разных схем. Тест "геострофически сбалансированное течение".

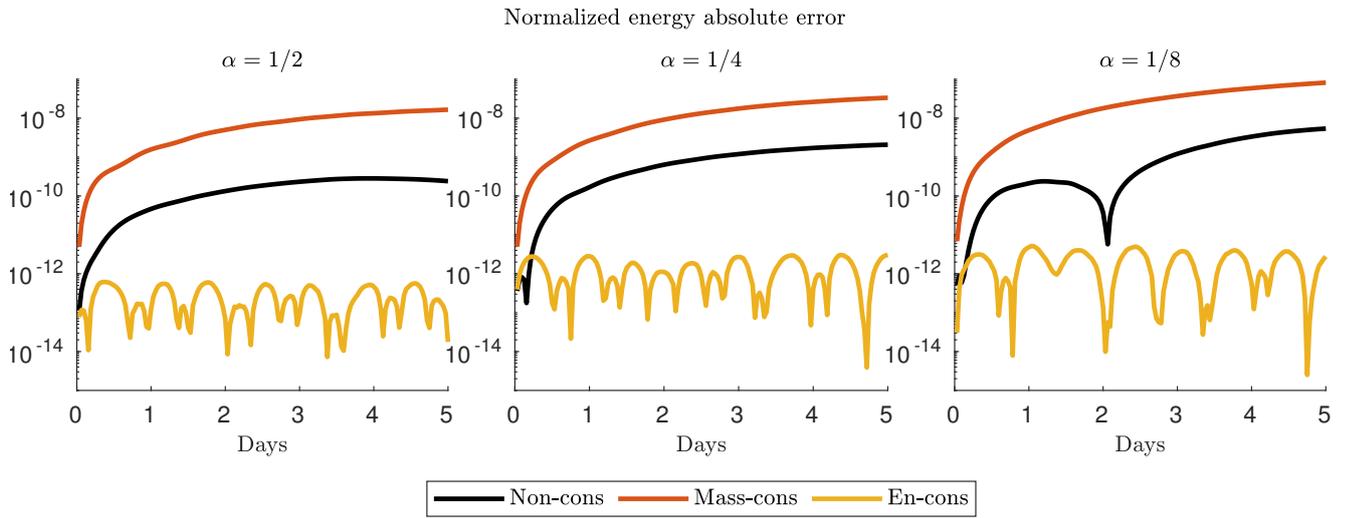


Рисунок 1.9 — Эволюция во времени относительной ошибки сохранения энергии для разных схем. Тест "геострофически сбалансированное течение".

1.4. Полуявная полулагранжева модель мелкой воды на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных

В данном разделе перейдем к решению нелинейных уравнений мелкой воды на сфере с использованием рассмотренного в прошлых разделах подхода. Для аппроксимации по времени будем использовать полуявную схему с полулагранжевым описанием процесса адвекции.

В результате дискретизации по пространству Лагранжевой формы нелинейных уравнений мелкой воды на сфере (1.6), получаем следующую полудискретную систему уравнений:

$$\frac{du}{dt} = C_u v - \text{grad}_\lambda (gh + gh^s), \quad (1.73)$$

$$\frac{dv}{dt} = C_v u - \text{grad}_\varphi (gh + gh^s), \quad (1.74)$$

$$\frac{dh}{dt} = -h (\text{div}_\lambda u + \text{div}_\varphi v). \quad (1.75)$$

Здесь $C_u v$, $C_v u$ – аппроксимация силы Кориолиса в u и v узлах сетки.

Для дискретизации уравнений по времени используется полуявный полулагранжев метод. Для линейных членов уравнений применяется схема Кранк-Николсон, для нелинейных членов уравнений и процедуры вычисления траекторий полулагранжевых частиц применяется схема SETTLS [60].

1.4.1. Пространственная дискретизация уравнений

1.4.1.1. Проблема полюса редуцированной сетки

Как уже было отмечено выше, трудности применения регулярной широтно-долготной сетки связаны с анизотропией вблизи полюсов. С целью устранения основного недостатка этой сетки, в работе [15] была предложена редуцированная широтно-долготная сетка. Несмотря на то, что эта сетка весьма успешно применяется для решений уравнений динамики атмосферы в совокупности со спектральным или зональным Фурье-представлением полей, построение локальных аппроксимаций в сеточном пространстве на такой сетке оказалось проблематичным. Еще в 1970 году в работе [59] было показано, что применение конечно-разностной аппроксимации второго порядка на редуцированной широтно-долготной сетке приводит к отсутствию сходимости для горизонтального оператора дивергенции. Традиционно эту проблему называют "проблемой полюса редуцированной сетки" (reduced grid pole problem). В 2019 году в работе [41] был проведен строгий анализ данного явления для дискретизации горизонтальных операторов на неразнесенной редуцированной сетке. Этот анализ показал, что этой проблемы можно избежать при условии, что для численного дифференцирования и интерполяции вдоль зонального направления используются процедуры, которые точны для функций $\sin m\lambda$, $\cos m\lambda$ при $m \leq 2$.

Построение интерполяционных процедур, обладающих такими свойствами, в рамках рассматриваемого в данной главе подхода возможно, если в качестве базисных функций взять, например, кусочно-тригонометрические функции [41; 52]. Аппроксимации горизонтальных операторов, используемые в данном разделе, будут основаны на применении 5-ти точечной кусочно-тригонометрической

интерполяции вдоль долготы:

$$L_k(\lambda) = \sum_{i=k-2}^{k+2} t_i^k(\lambda) f_i, \quad (1.76)$$

$$t_i^k(\lambda) = \prod_{\substack{m=k-2 \\ m \neq i}}^{k+2} \frac{\sin [(\lambda - \lambda_m)/2]}{\sin [(\lambda_i - \lambda_m)/2]}. \quad (1.77)$$

Здесь $L_k(\lambda)$ – интерполяционный полином на промежутке $[\lambda_k - \Delta\lambda/2, \lambda_k + \Delta\lambda/2]$ (широтный индекс в формулах выше опущен, чтобы не загромождать запись). Такая интерполяционная процедура по построению точна для функций $\sin m\lambda$, $\cos m\lambda$, $m \leq 2$ и обладает четвертым порядком аппроксимации.

Формулы дифференцирования вдоль зонального направления могут быть получены методом неопределенных коэффициентов либо при помощи дифференцирования кусочно-тригонометрических интерполянтов [41].

1.4.1.2. Аппроксимация операторов градиента и дивергенции

Пространственная дискретизация уравнений вдоль меридионального направления основана на применении формул четвертого порядка аппроксимации:

$$(\operatorname{div}_\varphi v)_j = \frac{27 \left(W_j^{j+\frac{1}{2}} \tilde{v}_{j+\frac{1}{2}} - W_j^{j-\frac{1}{2}} \tilde{v}_{j-\frac{1}{2}} \right) - \left(W_j^{j+\frac{3}{2}} \tilde{v}_{j+\frac{3}{2}} - W_j^{j-\frac{3}{2}} \tilde{v}_{j-\frac{3}{2}} \right)}{24a \cos \varphi_j \Delta \varphi_j}. \quad (1.78)$$

Здесь $\tilde{v}_{j+\frac{1}{2}} = (v \cos \varphi)_{j+\frac{1}{2}}$.

$$(\operatorname{grad}_\varphi h)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{27 \left(W_{j+\frac{1}{2}}^{j+1} h_{j+1} - W_{j+\frac{1}{2}}^j h_j \right) - \left(W_{j+\frac{1}{2}}^{j+2} h_{j+2} - W_{j+\frac{1}{2}}^{j-1} h_{j-1} \right)}{24a \Delta \varphi_{j+\frac{1}{2}}}. \quad (1.79)$$

В качестве процедуры одномерной интерполяции вдоль долготы (матрицы W) используется кусочно-тригонометрическая интерполяция, описанная выше.

Для приближенного вычисления производной вдоль долготы используется формула четвертого порядка аппроксимации:

$$(\delta_\lambda q)_{i,j} = \frac{(2 \cos \frac{\Delta\lambda_j}{2} + 1)^2 (q_{i+\frac{1}{2},j} - q_{i-\frac{1}{2},j}) - \frac{1}{4 \cos^2 \frac{\Delta\lambda_j}{2} - 1} (q_{i+\frac{3}{2},j} - q_{i-\frac{3}{2},j})}{4 \sin \Delta\lambda_j (\cos \frac{\Delta\lambda_j}{2} + 1)} \quad (1.80)$$

Оператор δ_λ точен для функций $\sin(m\lambda)$, $\cos(m\lambda)$ при $m \leq 2$. Формулы для аппроксимации зональной части оператора дивергенции и градиента:

$$(\operatorname{div}_\lambda u)_{i,j} = \frac{(\delta_\lambda u)_{i,j}}{a \cos \Delta\varphi_j}, \quad (1.81)$$

$$(\operatorname{grad}_\lambda h)_{i,j} = \frac{(\delta_\lambda h)_{i,j}}{a \cos \Delta\varphi_j}. \quad (1.82)$$

1.4.1.3. Аппроксимация силы Кориолиса

Для аппроксимации силы Кориолиса используется кусочно-кубическая интерполяция вдоль широты в совокупности с кусочно-тригонометрической интерполяцией вдоль долготы:

$$(C_u v)_j = \frac{f_j}{\cos \varphi_j} \circ \sum_{k=-2}^1 c_j^{j+\frac{1}{2}+k} S_j^{j+\frac{1}{2}+k} v \tilde{\cos} \varphi_{j+\frac{1}{2}+k}, \quad (1.83)$$

$$(C_v u)_{j+\frac{1}{2}} = -f_{j+\frac{1}{2}} \circ \sum_{k=-1}^2 c_{j+\frac{1}{2}}^{j+k} S_{j+\frac{1}{2}}^{j+k} u_{j+k}. \quad (1.84)$$

Здесь $c_j^{j+\frac{1}{2}+k}$, $c_{j+\frac{1}{2}}^{j+k}$ – коэффициенты кусочно-кубической Лагранжевой интерполяции, матрицы S соответствуют интерполяционным процедурам вдоль долготы.

1.4.1.4. Полулагранжева адвекция

Интерполяция значений сеточных функций в исходные точки полулагранжевых траекторий производится с использованием комбинированной кусочно-полиномиальной (вдоль широты), кусочно-тригонометрической (вдоль долготы) интерполяции.

1.4.2. Численные эксперименты

В данном разделе приведены результаты численных экспериментов для реализованной модели мелкой воды на сфере. Во всех экспериментах используется редуцированная сетка с 16 узлами сетки вдоль долготы на приполярной широте. Для построения редуцированной сетки применяется метод, используемый для численных экспериментов в рамках линейных уравнений мелкой воды.

1.4.2.1. Сходимость дискретного оператора Лапласа

Исследуем сходимость относительной l_∞ нормы ошибки приближенного вычисления лапласиана функции. В качестве тестовых функций используется сферические гармоники $\cos^l \varphi \sin l\lambda$, с $l = 1..4$. Результаты расчетов приведены на рисунке 1.10. Здесь "Regular grid" и "Reduced trig" – результаты для схемы, использующей расчетные формулы (1.78), (1.79), (1.81), (1.82) на редуцированной и регулярной сетке. Также с целью демонстрации эффекта проблемы полюса редуцированной сетки и важности применения процедур дифференцирования и интерполяции вдоль зонального направления точных для тригонометрических функций приводятся результаты расчетов для схемы, использующую кусочно-полиномиальную интерполяцию и стандартную схему четвертого порядка вычисления производной вдоль долготы. Результаты расчетов для такой схемы обозначаются "Reduced poly".

Из рисунков видно, что для тестовых функций с $l = 1, 2$, предложенные аппроксимации демонстрируют результаты аналогичные результатам на регулярной сетке, при этом для схемы "Reduced poly" наблюдается отсутствие сходимости ошибки, что является проявлением проблемы полюса редуцированной сетки. Для тестовых функций с $l = 3, 4$ предложенные аппроксимации демонстрируют уменьшение скорости сходимости ошибки по сравнению со схемой на регулярной сетке.

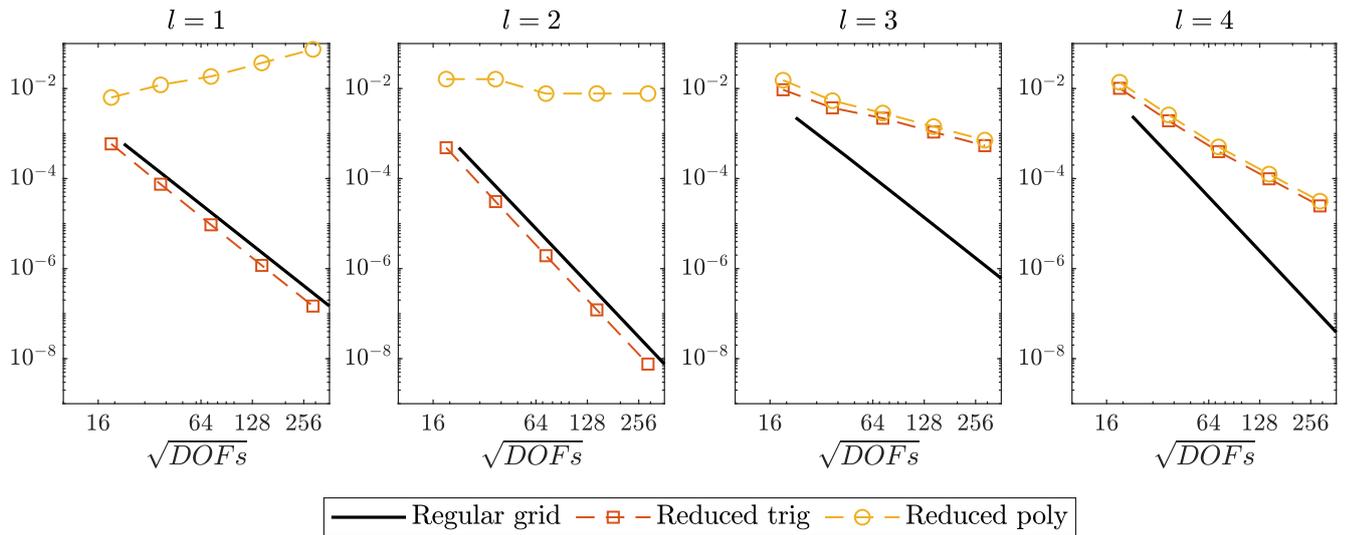


Рисунок 1.10 — Сходимость относительной l_∞ нормы ошибки приближенного вычисления оператора Лапласа от тестовых функций $\cos^l \varphi \sin l\lambda$.

1.4.2.2. Сходимость дискретного оператора силы Кориолиса

Аналогично предыдущему разделу, исследуется относительная l_∞ норма ошибки приближенного вычисления силы Кориолиса. В качестве тестовых функций используются поля $u = \sin l\lambda \cos^{l-1} l\lambda \sin \varphi$, $v = \cos l\lambda \cos^{l-1} l\lambda$. Результаты расчетов приведены на рисунке 1.11. "Regular grid" и "Reduced trig" – результаты для схемы, использующей расчетные формулы (1.83), (1.84) на редуцированной и регулярной сетке; "Reduced poly" – результаты расчетов для схемы, использующей кусочно-кубическую интерполяцию вдоль долготы вместо кусочно-тригонометрической.

1.4.2.3. Геострофическое равновесие

В рамках данного теста (тест номер 2 из работы [43]) рассматривается находящийся в состоянии устойчивого геострофического равновесия зональный поток, который является стационарным аналитическим решением уравнений мелкой воды. Для того чтобы поток проходил через области редукции сетки,

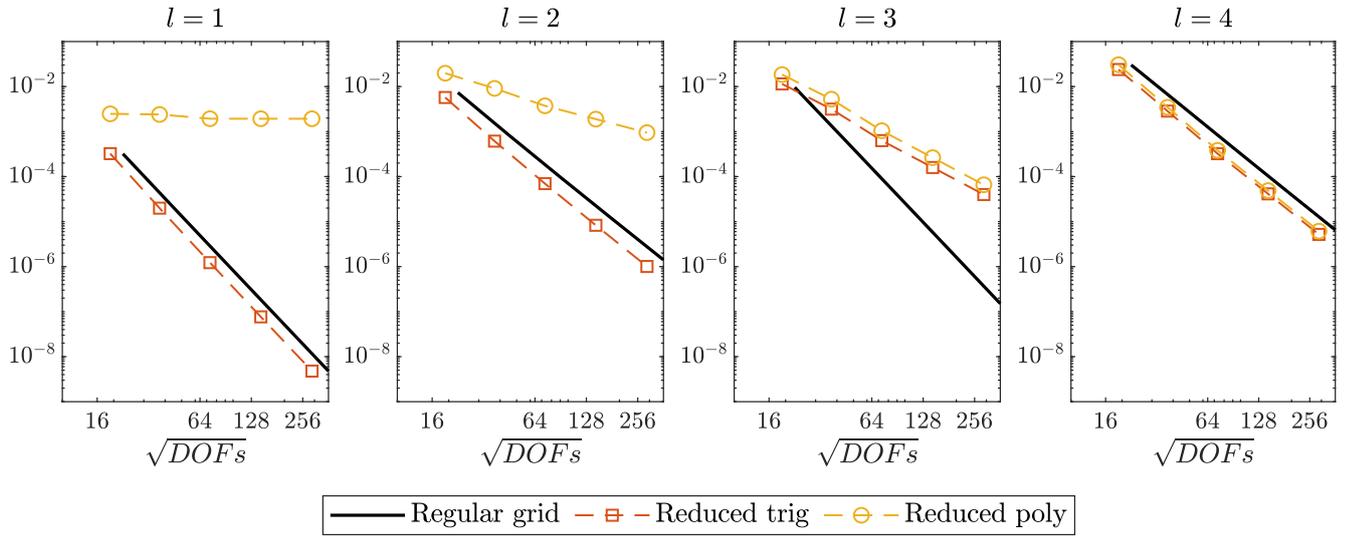


Рисунок 1.11 — Сходимость относительной l_∞ нормы ошибки приближенного вычисления силы Кориолиса для тестовых функций $u = \sin l\lambda \cos^{l-1} l\lambda \sin \varphi$,
 $v = \cos l\lambda \cos^{l-1} l\lambda$.

полярная ось вычислительной сетки повернута относительно Земной оси на угол $\gamma = \pi/4$.

Поля скорости ветра и уровня жидкости задаются как:

$$u = u_0 (\cos \varphi \cos \gamma + \cos \lambda \sin \varphi \sin \gamma), \quad (1.85)$$

$$v = -u_0 \sin \lambda \sin \gamma, \quad (1.86)$$

$$gh = gh_0 - \left(a\Omega u_0 - \frac{u_0^2}{2} \right) (-\cos \lambda \cos \varphi \sin \gamma + \sin \varphi \cos \gamma)^2. \quad (1.87)$$

Здесь $\Omega = 7.292 \times 10^{-5} \text{c}^{-1}$ — угловая скорость вращения Земли, $u_0 = \frac{2\pi a}{12 \text{ days}} \text{м/с}$ — максимальная скорость потока, $gh_0 = 2.94 \times 10^4 \text{м}^2/\text{c}^2$ — максимальная геопотенциальная высота слоя жидкости.

Расчеты проводятся для реализованной модели на редуцированной сетке с количеством узлов вдоль широты $N_\varphi = 32, 64, 128$. На рисунке 1.12 приведена эволюция относительной l_2 нормы ошибки поля h , для сравнения также проведен расчет для модели на регулярной сетке с $N_\varphi = 128$. Видно что для расчетов с $N_\varphi = 128$ не наблюдается разницы в точности между результатами на регулярной и редуцированной сетке. На рисунке 1.13 приведена сходимость относительной l_2 нормы ошибки поля h на 5 сутки модельного времени, наблюдается сходимость близкая к четвертому порядку. На рисунке 1.14 изображено поле высоты слоя жидкости и его ошибка на пятые сутки модельного време-

ни. Можно заметить, что для поля ошибки не наблюдается особенностей вблизи полюсных точек сетки.

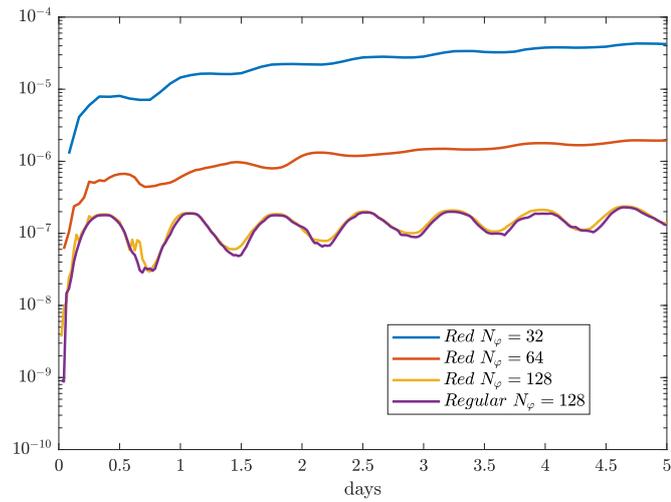


Рисунок 1.12 — Эволюция во времени относительной l_2 нормы ошибки поля h в тесте "геострофическое равновесие".

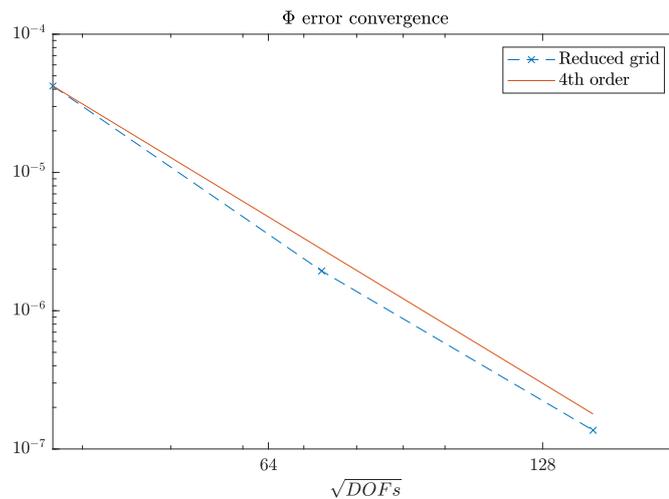


Рисунок 1.13 — Сходимость относительной l_2 нормы ошибки поля h в момент времени $T = 5$ дней в тесте "геострофическое равновесие".

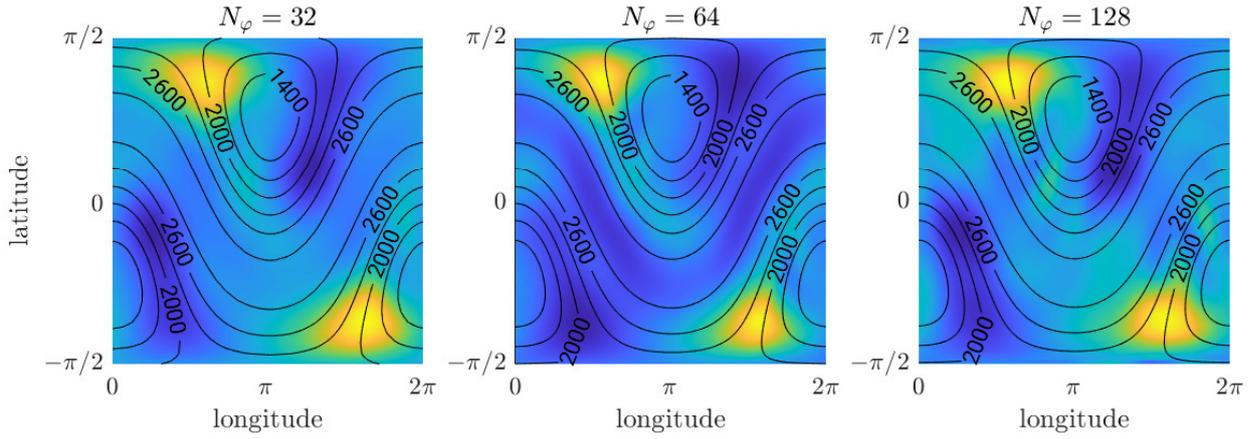


Рисунок 1.14 — Поле высоты уровня жидкости h (контуры) и величина ошибки (заливка цветом) в момент времени $T = 5$ дней в тесте "геострофическое равновесие".

1.4.2.4. Баротропная неустойчивость

Рассматривается тест "баротропная неустойчивость", предложенный в работе [44]. Поле скорости в начальный момент времени представляет собой зональное струйное течение в средних широтах, задаваемое выражением

$$u(\lambda, \varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi \leq \varphi_0, \\ Au_0 \exp [(\varphi - \varphi_0)(\varphi - \varphi_1)]^{-1}, & \varphi_0 \leq \varphi \leq \varphi_1, \\ 0, & \varphi \geq \varphi_1. \end{cases} \quad (1.88)$$

Здесь $u_0 = 80$ м/с, $A = 1/\exp(-4/(\varphi_1 - \varphi_0)^2)$, $\varphi_0 = \pi/7$, $\varphi_1 = \pi/2 - \pi/7$. Поле высоты уровня жидкости сначала подбирается таким образом, чтобы система была геострофически сбалансированной, после чего к этому полю добавляется малое возмущение, нарушающее геострофический баланс:

$$gh(\lambda, \varphi) = gh_0 - \int_{-\pi/2}^{\varphi} au(\lambda, \varphi') \left(f + \frac{\text{tg } \varphi'}{a} u(\lambda, \varphi') \right) d\varphi' + \quad (1.89)$$

$$+ gh_{\text{pert}} \cos \varphi \exp -\frac{\lambda}{9} \exp -\frac{(\varphi - \pi/4)^2}{225}. \quad (1.90)$$

Здесь $gh_{pert} = 1178\text{м}^2/\text{с}^2$. Для того чтобы поток проходил через области редукции сетки, полярная ось вычислительной сетки повернута относительно Земной оси на угол $\gamma = \pi/8$.

Нарушение геострофического баланса приводит к развитию баротропной неустойчивости. Сложность теста состоит в том, что ошибки численной аппроксимаций могут приводить к неправильной локализации развития неустойчивости. В рамках данного теста рассматривается поле относительной завихренности на 6 сутки модельного времени. Расчеты проводятся на сетках с $N_\varphi = 64, 128, 256$. Численные решения на редуцированной сетке визуально сравниваются с решением на регулярной сетке высокого пространственного разрешения, которое считается эталонным решением.

На рисунке 1.15 изображено поле относительной завихренности на 6 сутки модельного времени. При повышении пространственного разрешения редуцированной сетки результаты численных расчетов визуально становятся более близкими к эталонному решению. Для сетки с $N_\varphi = 128$ решение уже хорошо согласуется с эталонным решением, для сетки с $N_\varphi = 256$, решения визуально уже практически не отличимы.

1.5. Основные результаты главы

В данной главе рассматривался вопрос построения горизонтальных аппроксимаций на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных. Предложенный подход основывается на применении одномерных интерполяционных процедур вдоль долготы для построения разностных схем. В рамках линеаризованных уравнений мелкой воды на вращающейся сфере проведено исследование консервативности предложенных схем. Получены необходимые и достаточные условия наличия дискретных аналогов законов сохранения массы и полной энергии, а также предложен подход для построения одномерных интерполяционных процедур, удовлетворяющих этим ограничениям. Анализ дисперсионных характеристик гравитационных волн показал, что предложенные аппроксимации демонстрируют результаты, близкие к результатам разностных схем на регулярной сетке с разнесением переменных.

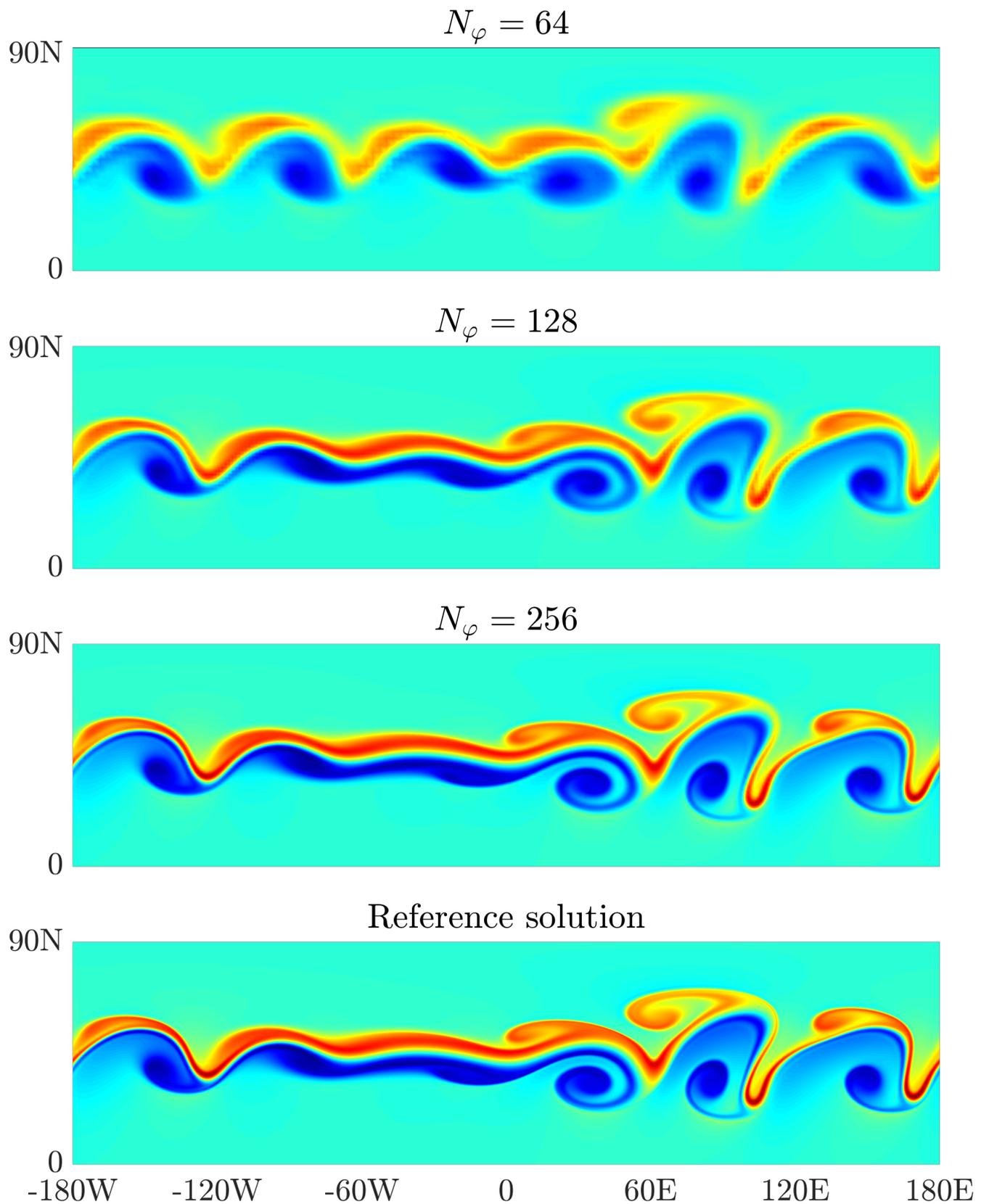


Рисунок 1.15 — Поле относительной завихренности на момент времени $T = 6$ дней для теста "баротропная неустойчивость".

Предложенный подход для построения дискретизаций использовался для создания полунявной полулагранжевой модели мелкой воды на вращающейся сфере. Реализованная модель была испытана на общепринятых тестах "Сбалансированный геострофический поток" и "Баротропная неустойчивость". Численные эксперименты показали близость полученных решений с результатами, полученными при использовании регулярной сетки с разнесением переменных. Таким образом, показана принципиальная возможность применения редуцированной сетки с разнесением переменных для численного моделирования динамики атмосферы.

Глава 2. Разработка масштабируемых алгоритмов решения эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетке

Оперативные модели численного прогноза погоды и моделирования климата должны решать трехмерные уравнения динамики атмосферы за очень короткий промежуток времени. Современные реализации таких моделей должны сочетать в себе применение точных пространственных аппроксимаций, эффективных алгоритмов интегрирования по времени и эффективную масштабируемость на современных суперкомпьютерах, содержащих десятки и сотни тысяч вычислительных элементов и множество уровней параллелизма.

Уравнения гидротермодинамики атмосферы представляют собой типичный пример жесткой системы, описывающий широкий спектр явлений с временными масштабами от нескольких месяцев до секунд. Вычислительная эффективность процедуры численного решения таких систем во многом определяется выбранным алгоритмом интегрирования уравнений по времени. При использовании явных методов возникает ограничение на размер шага интегрирования по времени, который (для устойчивости расчета) не должен превышать отношения шага сетки к скорости самого быстрого процесса (ограничение на число Куранта). Для уравнений динамики атмосферы такими процессами являются распространение звуковых и инерционно-гравитационных волн. При этом энергетический вклад быстрых инерционно-гравитационных и звуковых волн является незначительным с точки зрения прогноза погоды и моделирования климата по сравнению с вкладом медленных процессов, таких как распространения волн Россби [61]. Таким образом, шаг по времени, определяемый из требования устойчивого интегрирования для процессов распространения звуковых и инерционно-гравитационных волн, намного меньше шага, определяемого из соображений точности получаемых решений. Неявные методы интегрирования по времени, в отличие явных, позволяют использовать шаги интегрирования по времени заметно превышающие шаг, определяемый числом Куранта. Однако, в общем случае, применение таких методов приводит к необходимости решения нелинейной системы уравнений на каждом шаге по времени. Эффективное решение такой системы является сложной задачей, затраты на которую могут перекрывать выигрыш от использования больших шагов интегрирования по времени. В 1980-х годах А. Робером [24] предложил так называемую полунеявную

схему интегрирования по времени, которая во многом основывалась на идеях схем расщепления по времени, предложенных Г.И. Марчуком [62]. Суть полунявного подхода заключается в следующем. Оператор уравнения разделяется на линейную и нелинейную части, путем линеаризации членов, ответственных за распространение быстрых волн. Далее для линейной части оператора применяется некоторая неявная аппроксимация (например, метод трапеций), а для нелинейной части применяется некоторый явный метод. В результате получается метод, который, с одной стороны, позволяет использовать довольно большие шаги интегрирования по времени (особенно в сочетании с полулагранжевым подходом для аппроксимации адвекции), с другой стороны, требует решения только линейной системы алгебраических уравнений в отличие от полностью неявных методов, что является существенно более простой задачей, чем решение системы нелинейных алгебраических уравнений. Начиная с 1990-х годов, полунявный метод интегрирования по времени стал широко использоваться в оперативных моделях прогноза погоды. На сегодняшний день этот метод применяется, например, в оперативной глобальной модели ПЛАВ Гидрометцентра России, в модели Европейского Центра Среднесрочных Прогнозов Погоды (ЕЦСПП) [63], а также в модели национальной метеорологической службы Великобритании [64].

Основные вычислительные затраты при использовании полунявного метода связаны с необходимостью решения системы линейных алгебраических уравнений с большой разреженной матрицей на каждом шаге по времени модели. При использовании высокого пространственного разрешения, количество неизвестных этой системы может достигать значений порядка $O(10^{10})$. Учитывая временные ограничения, связанные с оперативными рамками для численного прогноза погоды (обычно, не более 15 минут для прогноза на 24 часа), задачи такого масштаба могут быть решены только с использованием массивно-параллельных систем. Таким образом, целесообразность применения полунявного подхода определяется численной эффективностью и параллельной масштабируемостью используемой процедуры решения возникающей системы линейных уравнений. При этом для достижения максимальной производительности этих решателей важно не только выбрать оптимальный алгоритм, но и максимально учесть специфику задачи при его реализации [25]. Поэтому в моделях численного прогноза погоды принято использовать собственные реализации алгоритмов [65–67], даже если существуют универсальные библиотечные аналоги.

Многосеточный метод [68–71] является одним из наиболее эффективных методов для решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих вследствие дискретизации уравнений в частных производных эллиптического типа. Этот алгоритм позволяет решать плохо обусловленные системы уравнений за время, пропорциональное количеству неизвестных в системе, и при этом не требует выполнения глобальных операций (скалярных произведений), что позволяет эффективно использовать этот метод на массивно-параллельных вычислительных системах. Из-за алгоритмически оптимальной производительности и масштабируемости эти методы часто применяются для крупномасштабных приложений в геофизическом моделировании. Например, библиотека `hype` [72] содержит массивно-параллельные реализации многосеточного алгоритма и, как было показано в работе [73], масштабируется до сотен тысяч ядер. Так же масштабируемость решателя AMG в библиотеке DUNE [74] была продемонстрирована в [75].

Хотя эти результаты явно показывают значительный потенциал параллельных многосеточных алгоритмов, из обзора [25] видно, что эти методы только начинают приобретать популярность в полунеявных моделях атмосферы. В качестве примеров можно привести внедрение многосеточного метода в полунеявную версию модели MPAS [76], внедрение многосеточного метода на регулярной широтно-долготной сетке [66] в оперативную модель ENDGame [64] метеослужбы Великобритании, реализацию многосеточного метода на сетке кубическая сфера в рамках перспективного динамического ядра GungHo [65].

Редуцированная широтно-долготная сетка рассматривается как один из возможных перспективных вариантов для использования в глобальных моделях атмосферы высокого пространственного разрешения. При этом полунеявный полулагранжев алгоритм является одним из наиболее вероятных методов интегрирования по времени для такой модели. В данной главе приводится описание разработанного автором параллельного геометрического алгоритма для решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих вследствие применения полунеявного метода на редуцированной широтно-долготной сетке. Данный алгоритм основан на применении модификации метода условного сгрубления сетки [66; 77] и равномерного распределения точек грубой сетки по долготе. Геометрический многосеточный алгоритм на редуцированной широтно-долготной сетке разработан впервые в мире.

Результаты данной главы опубликованы в работах [26; 28]. Глава состоит из 5 разделов. В разделе 2.1 приведены модельные уравнения, в рамках которых будет производиться исследование предложенного алгоритма. В разделе 2.2 описывается предложенный автором многосеточный алгоритм. Раздел 2.3 посвящен параллельной реализации многосеточного метода. В разделе 2.4 приводятся результаты численного исследования сходимости и масштабируемости алгоритма. В разделе 2.5 приведен обзор основных результатов данной главы

2.1. Модельные уравнения

В качестве модельного уравнения при разработке геометрического многосеточного алгоритма будем использовать полунявную полулагранжеву дискретизацию уравнений мелкой воды на сфере. Уравнения мелкой воды в Лагранжевой форме с адвективной формой силы Кориолиса могут быть записаны в виде

$$\frac{d(\mathbf{v} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})}{dt} = -\nabla(gh + gh_s), \quad (2.1)$$

$$\frac{dh}{dt} = -h\nabla \cdot \mathbf{v} \equiv -(h - h_{ref})\nabla \cdot \mathbf{v} - h_{ref}\nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (2.2)$$

Здесь h , h_s – толщина слоя жидкости и уровень поверхности соответственно. Для разделения оператора правой части уравнения неразрывности на линейную и нелинейную части используется константа h_{ref} . Воспользуемся полунявной полулагранжевой дискретизацией по времени, основанной на применении метода трапеций для линейной части уравнений и схемы SETTLS [60] для нелинейных слагаемых:

$$\frac{(\mathbf{v} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})_A^{n+1} - \Lambda(\mathbf{v} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})_D^n}{\Delta t} = -\frac{g}{2} [(\nabla h)_A^{n+1} + \Lambda(\nabla h)_D^n] - \quad (2.3)$$

$$-\frac{g}{2} [(\nabla h_s)_A^{n+1} + \Lambda(\nabla h_s)_D^n], \quad (2.4)$$

$$\frac{h_A^{n+1} - h_D^n}{\Delta t} = -\frac{h_{ref}}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{v})_A^{n+1} + (\nabla \cdot \mathbf{v})_D^n] \quad (2.5)$$

$$-\frac{1}{2} \left([(h - h_{ref})\nabla \cdot \mathbf{v}]_D^{n+1} + [(h - h_{ref})\nabla \cdot \mathbf{v}]_A^n \right).$$

Здесь $(\)_A^{n+1}$ – значение функции в узлах сетки в момент времени t^{n+1} , $(\)_D^n$ – значения функции в начальных точках полулагранжевых траекторий в момент времени t^n , Λ – матрица поворота, используемая для учета изменения направления векторов локального базиса в начальной и конечной точке траекторий. Группируя в левой части уравнений все неизвестные величины, получаем:

$$\mathbf{v}_A^{n+1} + \frac{g\Delta t}{2}(\nabla h)_A^{n+1} = R_v, \quad (2.6)$$

$$h_A^{n+1} + \frac{h_{ref}\Delta t}{2}[(\nabla \cdot \mathbf{v})_A^{n+1}] = R_h, \quad (2.7)$$

где R_v , R_h – комбинация значений известных величин в моменты времени t^n и t^{n-1} , конкретный вид которых не важен в контексте данной главы. Применяя к первому уравнению оператор дивергенции и подставляя результат во второе уравнение, получаем эллиптическое уравнение типа Гельмгольца (далее индексы $n + 1$, A опущены):

$$h - \frac{gh_{ref}\Delta t^2}{4}\nabla \cdot \nabla h = R_h - \frac{gh_{ref}\Delta t}{2}\nabla \cdot R_v. \quad (2.8)$$

В результате дискретизации этого уравнения по пространству получается система линейных алгебраических уравнение вида:

$$\left(I - \frac{h_{ref}\Delta t^2}{4}L\right)h = R, \quad (2.9)$$

где I – единичная матрица, L – дискретный аналог горизонтального оператора Лапласа.

Для дальнейшего изучения свойств уравнения (2.9) можно рассмотреть дискретизацию оператора Лапласа на бипериодической плоскости $(x,y) \in [0,2\pi) \times [0,2\pi)$. Для простоты рассматривается трехточечная аппроксимация второго порядка на равномерной сетке с одинаковым количеством узлов n и шагом сетки $\Delta = \frac{2\pi}{n}$ вдоль обоих направлений:

$$(Lh)_{i,j} = \frac{h_{i+1,j} - 2h_{i,j} + h_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{h_{i,j+1} - 2h_{i,j} + h_{i,j-1}}{\Delta^2}. \quad (2.10)$$

Легко показать, что собственные значения $\theta_{k,m}$ матрицы L в таком случае выражаются как

$$\theta_{k,m} = -\frac{4}{\Delta^2} \left(\sin^2 \frac{k\Delta}{2} + \sin^2 \frac{m\Delta}{2} \right), \quad k,m \in [0, n-1], \quad (2.11)$$

а собственные значения матрицы из уравнения (2.9) тогда равны

$$\tilde{\theta}_{k,m} = 1 + \frac{h_{ref}\Delta t^2}{\Delta^2} \left(\sin^2 \frac{k\Delta}{2} + \sin^2 \frac{m\Delta}{2} \right). \quad (2.12)$$

При этом $\min_{k,m} |\tilde{\theta}_{k,m}| = 1$, $\max_{k,m} |\tilde{\theta}_{k,m}| = 1 + \frac{2h_{ref}\Delta t^2}{\Delta^2}$, то есть число обусловленности этой матрицы равно

$$\mu = 1 + \frac{2gh_{ref}\Delta t^2}{\Delta^2}. \quad (2.13)$$

Величину gh_{ref} можно интерпретировать как квадрат фазовой скорости линейных гравитационных волн $c_g = \sqrt{gh_{ref}}$. Если ввести в рассмотрение число Куранта, соответствующее процессу распространения этих волн,

$$\sigma = \frac{c_g\Delta t}{\Delta}, \quad (2.14)$$

число обусловленности μ уравнения Гельмгольца можно записать в виде

$$\mu = 1 + 2\sigma^2. \quad (2.15)$$

Таким образом, для модельного уравнения на бипериодической плоскости показано, что число обусловленности (а значит и скорость сходимости большинства итерационных методов решения систем линейных уравнений) определяется числом Куранта для скорости распространения линейных гравитационных волн. При этом, если число Куранта остается постоянным при измельчении сетки, количество итераций, необходимое для решения системы, также должно оставаться постоянным.

Понятно, что полученный результат (по крайней мере, качественно) остается верным и для случая модельного уравнения на поверхности сферы, так как величина максимального по модулю собственного значения матрицы L в данном случае также обратно пропорционально квадрату минимального шага сетки по пространству (следует из теоремы Гершгорина).

Исследование свойств предложенного многосеточного алгоритма будет производиться в рамках дискретизации модельного уравнения (2.8) на редуцированной широтно-долготной сетке. Поясним, почему рассмотрение такого модельного уравнения актуально в контексте трехмерных глобальных атмосферных моделей. Для глобальных моделей, использующих гидростатическое приближение, применение полуявного подхода приводит к возникновению набора независимых двумерных уравнений Гельмгольца вида (2.8) (вывод этих

уравнений для глобальной гидростатической модели ПЛАВ приведен в Приложении А). Количество уравнений при этом равно количеству вертикальных уровней, значение аналога константы h_{ref} в этих уравнениях также зависит от вертикального уровня. Таким образом алгоритм решения уравнений (2.8) без изменений переносится на этот случай. При использовании полунявного подхода в рамках негидростатической модели атмосферы в уравнении Гельмгольца (помимо горизонтальной части оператора, аналогичной уравнению (2.8)) возникает член, содержащий производные вдоль вертикального направления. В работах [25; 65; 78] показано, что многосеточный алгоритм решения двумерных горизонтальных задач может быть легко обобщен на этот случай за счет использования идеи многосеточного алгоритма тензорного произведения (tensor product multigrid algorithm) [78]. В этом случае матрицу системы разбивают на матрицу, определяющую связи между неизвестными в горизонтальном направлении, и матрицу, определяющую связи между неизвестными в вертикальном направлении. Последнюю используют в качестве предобуславливателя в процедуре "сглаживания" высокочастотных компонент ошибки. Для этого, обычно, применяется метод прогонки. Это не влияет на параллельную реализацию алгоритма, так как в моделях атмосферы, как правило, не используется декомпозиция расчетной области по MPI-процессам вдоль вертикального направления. Таким образом, построение и исследования свойств многосеточного алгоритма в рамках модельного уравнения, возникающего вследствие полунявной полулагранжевой аппроксимации уравнений мелкой воды, является оправданным.

2.2. Описание многосеточного алгоритма

Одними из первых предложенных итерационных алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений являются стационарные итерационные методы (или методы простых итераций), такие как метод Якоби, Гаусса-Зейделя или релаксации. И хотя применение этих методов для решения уравнений Пуассона или Гельмгольца приводит к довольно низкой скорости сходимости, они эффективно подавляют мелкомасштабную часть ошибки. Таким образом, обычно, применения 2-3 итераций этих методов достаточно для того чтобы поле ошибки стало довольно гладкой функцией [68].

Многосеточные методы [68–71], основаны на следующей основной идее: если нам удалось построить алгоритм, который позволяет эффективно подавить мелкомасштабную часть ошибки (так называемый оператор сглаживания), то дальнейшее уточнение решения можно производить на более грубой сетке, что требует выполнения меньшего количества арифметических операций. Более того, гладкая функция ошибки при переходе на более грубую сетку вновь приобретает мелкомасштабную часть, которая может быть эффективно исключена при помощи применения оператора сглаживания уже на грубой сетке. Пользуясь описанной выше логикой, введем в рассмотрение так называемый двухсеточный алгоритм для решения системы уравнений $Ax = b$:

- выполняется несколько итераций метода, эффективно подавляющего мелкомасштабную часть ошибки (итерации "предсглаживания"). В результате получается приближенное решение системы \tilde{x} , ошибка которого $\xi = x - \tilde{x}$ является гладкой функцией;
- так как ξ является гладкой функцией, решение уравнения $A\xi = r$, где $r = b - A\tilde{x}$ можно производить на более грубой сетке. Для этого в рассмотрение вводится оператор перехода на более грубую сетку – оператор сгрубления R , и рассматривается решение уравнения $A_c\xi_c = Rr$, где A_c – дискретизация исходного эллиптического уравнения на более грубой сетке;
- функция ξ_c , полученная в результате решения уравнения $A_c\xi_c = Rr$ переносится обратно на исходную сетку при помощи оператора продолжения P ;
- выполняется коррекция приближенного решения $x \approx \tilde{x} + P\xi_c$. Для исключения высокочастотной компоненты ошибки, которая могла возникнуть в результате применения оператора продолжения, обычно, выполняют несколько применений оператора сглаживания (итерации "постсглаживания").

Рекурсивное применение двухсеточного метода для решения возникающих на грубых сетках уравнений приводит к многосеточному алгоритму с V-циклом. На самой грубой сетке многосеточного метода матрица системы имеет довольно маленький размер и решение может быть получено при помощи некоторого прямого метода или нескольких итераций оператора сглаживания.

Таким образом, для построения многосеточного алгоритма требуется определить его основные компоненты.

- Оператор сглаживания – метод, позволяющий эффективно уменьшить амплитуду высокочастотных компонент ошибки. Обычно применяется несколько итераций метода Якоби или метода Гаусса-Зейделя с красно-черным упорядочиванием переменных.
- Алгоритм построения последовательности грубых сеток. Для равномерных прямоугольных сеток, обычно, используется сгрубление сетки в два раза (отбрасывается каждый второй узел вдоль направления). В более сложных случаях узлы грубой сетки могут не являться подмножеством узлов мелкой сетки. Например, узлы грубой сетки могут быть центрами ячеек, полученными объединением ячеек мелкой сетки.
- Операторы продолжения R и сгрубления P (операторы перехода между сетками). Как правило, в качестве операторов продолжения используется билинейная интерполяция, а в качестве оператора сгрубления – оператор осреднения по соседним узлам.
- Аппроксимация системы уравнений на грубой сетке. Как правило используется прямая дискретизация исходного эллиптического уравнения на грубой сетке. Также можно использовать Галеркинский подход $A_c = PAR$, однако это может приводить к увеличению количества ненулевых элементов матрицы.
- Алгоритм обращения матрицы на самой грубой сетке. Если матрица системы хорошо обусловлена на самом нижнем уровне многосеточного алгоритма, достаточно применить несколько итераций оператора сглаживания.

В случае, когда алгоритм построения последовательности грубых сеток и операторы перехода между сетками не зависят от матрицы системы, а основаны только на геометрической информации о расчетной области, многосеточный метод называется геометрическим. Также существуют так называемые алгебраические версии многосеточного метода, в которых понятие гладкости функции а также компоненты метода определяются на основе анализа элементов матрицы системы. Такие алгоритмы, как правило, более универсальны, но требуют явного хранения элементов матрицы системы и дополнительных накладных расходов, связанных с фазой инициализации компонентов метода. В работе [25] показано, что применение менее универсальной собственной реализации геометрического многосеточного алгоритма позволяет заметно уменьшить время решения уравнения Гельмгольца на сетке кубическая сфера по сравнению с использованием

универсальных библиотечных реализаций алгебраического многосеточного метода.

Перейдем к описанию предложенного автором геометрического многосеточного метода на редуцированной широтно-долготной сетке.

Построение последовательности грубых сеток. Известно [69], что наличие анизотропии в расчетной сетке или в коэффициентах решаемого эллиптического уравнения приводит к уменьшению скорости сходимости многосеточных методов геометрического типа, так как стандартные варианты операторов сглаживания в этой ситуации перестают эффективно уменьшать высокочастотную компоненту ошибки. Для регулярной широтно-долготной сетки эта проблема возникает вблизи полюсных зон, где показатель анизотропии сетки достигает экстремально высоких значений. И хотя редуцированная широтно-долготная сетка обладает более равномерным распределением узлов, вблизи полюсных точек показатель анизотропии может быть достаточно высоким, чтобы влиять на сходимость метода в этой области.

Для решения проблемы анизотропии в рамках геометрического многосеточного метода существует два основных подхода – модификация оператора сглаживания или модификация алгоритма построения грубых сеток. В случае модификации оператора сглаживания обычно используются блочные варианты методов типа простой итерации, применение которых позволяет восстановить скорость сходимости алгоритма. Однако эти методы как правило менее эффективны с точки зрения параллельной реализации и вычислительно более затратны. Альтернативный подход – модификация алгоритма построения грубых сеток, основная идея которого состоит в сгрублении сетки только в тех областях или только в тех направлениях вычислительной области, где оператор сглаживания эффективно подавляет мелкомасштабную часть ошибки.

В работе [66] было предложено использовать метод условного сгрубления сетки [77] для построения геометрического многосеточного метода на регулярной широтно-долготной сетке. Суть метода состоит в том, что сетка всегда сгрубляется в долготном направлении, а в широтном направлении сгрубление происходит только в тех областях, где показатель анизотропии не слишком высок, то есть вдали от полюсных точек. При этом количество точек при переходе на более грубую сетку уменьшается приблизительно в три раза, а не в четыре.

В данной работе предлагается обобщить данный подход на случай редуцированной сетки. Для этого введем в рассмотрение показатель анизотропии для

заданной широты сетки

$$A_j = \left(\frac{2\Delta\lambda_j \cos \varphi_j}{\varphi_{j+1} - \varphi_{j-1}} \right)^2, \quad (2.16)$$

равный квадрату отношению величины шага вдоль долготного и широтного направлений. Тогда сгрубление сетки в широтном направлении будем производить только в тех областях, где выполняется

$$A_j \geq \frac{1}{2}. \quad (2.17)$$

Для сгрубления сетки вдоль направления обычно применяют подходы, при котором грубая сетка состоит из точек, которые являются подмножеством точек мелкой сетки или являются центрами ячеек, полученных объединением ячеек мелкой сетки. Однако применение этих методов для сгрубления редуцированной сетки вдоль долготного направления будет приводить к возникновению долготных полос с неравномерным шагом сетки, что значительно усложняет структуру данных и реализацию алгоритмов, используемых в многосеточном методе. Поэтому предлагается равномерно распределять точки грубой сетки по кругу долготы, а их количество выбирать как

$$N_c^\lambda(j) = \lfloor N^\lambda(j)/2 \rfloor + \text{mod}(N^\lambda(j), 2), \quad (2.18)$$

где $N_c^\lambda(j)$ и $N^\lambda(j)$ – количество узлов грубой и мелкой сетки соответственно, $\lfloor \cdot \rfloor$ – операция взятия целой части с округлением в меньшую сторону, $\text{mod}(\cdot, k)$ – остаток от целочисленного деления на k . Пример работы данного алгоритма приведен на Рисунке 2.1.

Операторы перехода между сетками. После применения нескольких итераций предсглаживания происходит вычисление невязки и её перенос на более грубую сетку при помощи оператора сгрубления. В качестве оператора сгрубления предлагается использовать оператор осреднения по объему:

$$(\psi_c)_i = \frac{1}{V(\Omega_i^c)} \sum_k (\psi_f)_k V(\Omega_i^c \cap \Omega_k^f) \quad (2.19)$$

где $(\psi_c)_i$, $(\psi_f)_k$ – значения функции в узлах грубой и мелкой сетки, Ω_i^c, Ω_k^f – ячейка расчетной области, соответствующая узлам на грубой и мелкой сетке, V – функция объема. Схематичное изображение приведено на Рисунке 2.2.

В качестве оператора продолжения (оператор перехода с грубой на мелкую сетку) предлагается использовать оператор билинейной интерполяции.

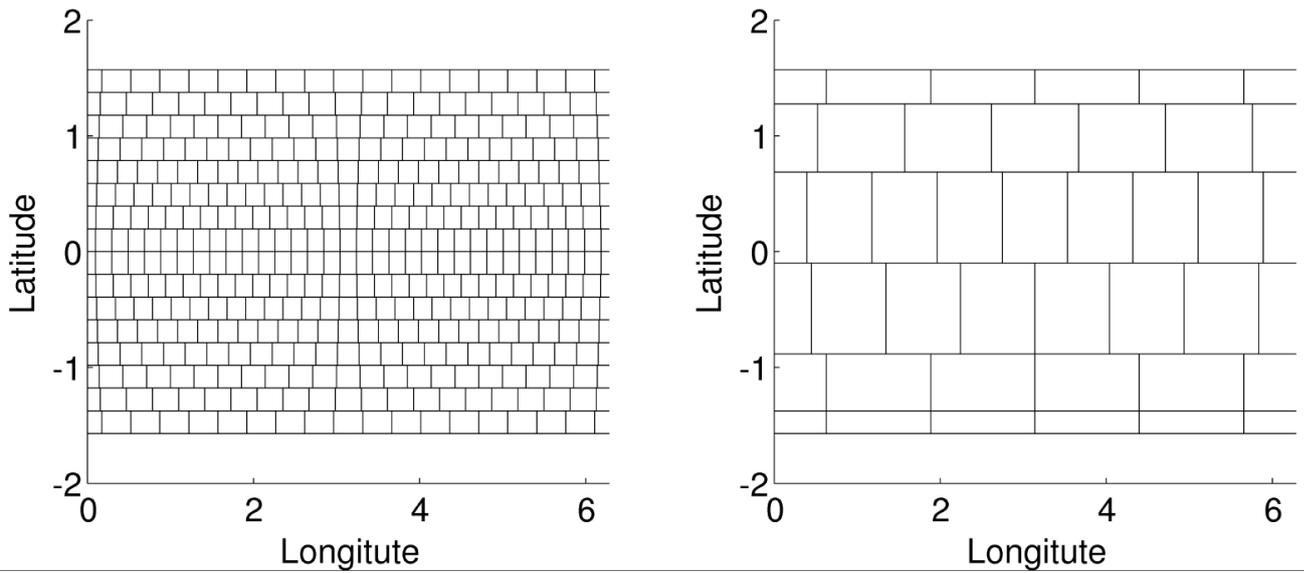


Рисунок 2.1 — Пример применения двух итераций предложенного алгоритма условного сгрубления для редуцированной широтно-долготной сетки.

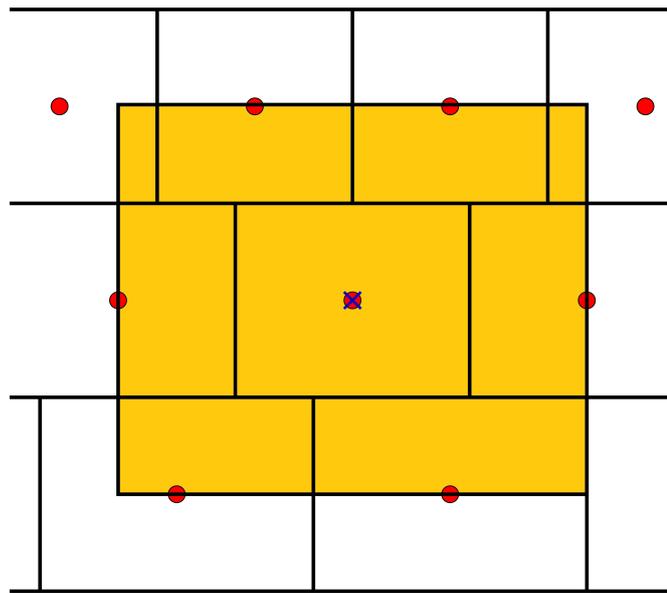


Рисунок 2.2 — Схематичное изображение действия оператора сгрубления. Желтым цветом обозначена ячейка грубой сетки.

Оператор сглаживания. Одним из основных компонентов многосеточного метода является процедура уменьшения амплитуды высокочастотных компонент ошибки. В рамках данного алгоритма предлагается использовать метод Якоби с взвешиванием:

$$x^{n+1} = x^n + \omega D^{-1}(b - Ax^n), \quad (2.20)$$

где ω – коэффициент взвешивания, D - диагональная часть матрицы A . Недостатком данного метода является наличие свободного параметра ω . Для модельных уравнений можно аналитически получить оптимальное значение данного параметра [69], в нашем случае используется значение $\omega = \frac{4}{5}$ (оптимальное значения для решения уравнения Пуассона в бипериодической области). Другой вариант оператора сглаживателя – метод Якоби с красно-черным упорядочиванием переменных. И хотя для дискретизации оператора Лапласа, описанной выше, обновление «красных» и «черных» точек области не является независимыми, как это происходит в случае применения стандартной пятиточечной аппроксимации на регулярной широтно-долготной сетке, применение данного метода позволяет получить хорошие характеристики сходимости многосеточного алгоритма.

Построение матрицы системы на грубой сетке. Для построения матрицы на грубых сетках используется прямая дискретизация исходного уравнения. Алгоритм генерации грубых сеток устроен таким образом, что их структура совпадает со структурой исходной сетки (равномерный шаг вдоль долготы), что заметно упрощает построение матрицы системы на грубой сетке.

2.3. Параллельная реализация

В данном разделе приводится описание параллельной реализации предложенного выше геометрического многосеточного метода. Для возможности распараллеливания кода на узлах с распределенной памятью используется технология MPI (Message Passing Interface). Применение технологии MPI является одним из наиболее распространенных подходов для организации обмена сообщениями между параллельными процессами на вычислительных системах с распределенной памятью.

Разработка новой глобальной модели атмосферы – длительный процесс, занимающий как правило около 5-10 лет до момента внедрения модели в оперативное использование. Поэтому целесообразным является создание собственной программной инфраструктуры, учитывающей особенности сетки, вычислительных методов и области применения конкретной модели. Такая инфраструктура предоставляет ключевые программные блоки (структуры данных, процедуры па-

раллельного обмена данными, процедуры ввода-вывода и диагностики и т.д.) разработчикам и пользователям модели для её разработки и обслуживания. На данный момент такие программные инфраструктуры для своих глобальных моделей атмосферы разрабатываются, например, в Европейском центре среднесрочных прогнозов погоды [67] и в Метеорологическом бюро Великобритании [79]. Так как разрабатываемые в рамках данной диссертации численные методы и алгоритмы рассматриваются как вариант для использования в рамках глобальной модели динамики атмосферы, логичным является уже на данном этапе начать реализовывать аналогичную программную инфраструктуру. Одним из основных компонентов такой инфраструктуры является библиотека параллельных обменов, определяющая структуру распределенного хранения данных и схему взаимодействия параллельных процессов. В рамках данной работы был разработан прототип такой библиотеки под названием ParRG (Parallel Reduced Grid). ParRG – это объектно-ориентированная библиотека, написанная на языке программирования Fortran, которая предоставляет алгоритмы и структуры данных для разбиения расчетной области по MPI-процессам, параллельных обменов и хранения данных на редуцированной широтно-долготной сетке. В рамках библиотеки определяются следующие ключевые типы данных:

- `tile_t`: элементарный элемент разбиения расчетной области по MPI-процессам. Описывает область, определяемую параметрами j_s , j_e – индекс начальной и конечной широты; $i_s(j)$, $i_e(j)$ – индекс начальной и конечной точки вдоль долготы на данной широте, N_z – количество узлов сетки по вертикали.
- `partition_t`: структура данных, содержащая информацию о разбиении расчетной области (массив объектов типа `tile_t`) и распределении данного разбиения по MPI-процессам. Для разбиения расчетной области используются алгоритмы, описанные ниже.
- `grid_function_t`: структура для распределенного хранения сеточных функций на редуцированной широтно-долготной сетке. Содержит в себе массив размерностью (количество точек по горизонтали, количество точек по вертикали) и дополнительные массивы, необходимые для адресации расчетных точек в рамках данного массива.

- `exchange_t`: тип данных, реализующий параллельные обмены между MPI-процессами. Содержит информацию и методы, необходимые для инициализации и выполнения параллельного обмена.

Реализованная библиотека ParRG используется для параллельной реализации всех компонентов предложенного многосеточного метода.

Одним из центральных элементов параллельной реализации является алгоритм распределения вычислительной нагрузки по параллельным процессам. Предлагается использовать подход для двумерной декомпозиции области, аналогичный используемому в модели Европейского центра среднесрочного прогноза погоды [80]. Данный алгоритм основан на применении рекурсивного алгоритма разбиения сферы на области равной площади и маленького диаметра [81], в рамках которого производится разбиение поверхности сферы на полосы $S_k = [0, 2\pi] \times [\varphi_k, \varphi_{k+1}]$, $k = 1 \dots L$, каждая из которых в свою очередь делится на m_k равных криволинейных прямоугольников $S_{i,k} = [(i-1)\frac{2\pi}{m_k}, i\frac{2\pi}{m_k}] \times [\varphi_k, \varphi_{k+1}]$. При этом общее количество подобластей является входным аргументом данного алгоритма и равно $\sum_{k=1}^L m_k$. Пример работы алгоритма приведен на рисунке 2.3.

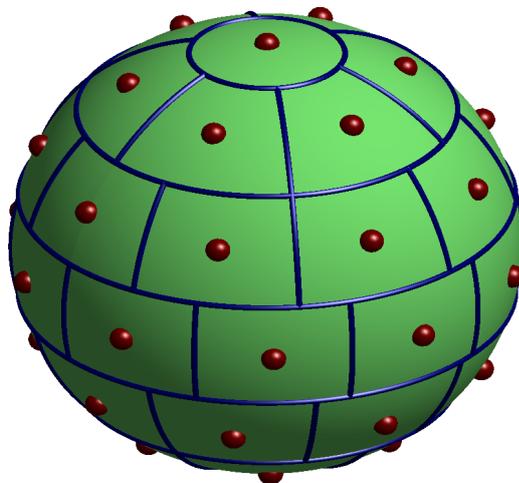


Рисунок 2.3 — Результат работы рекурсивного алгоритма разбиения сферы на области равной площади и маленького диаметра. Рассматривается разбиение сферы на 42 подобласти. Для построения картинке использовался код, представленный в работе [55].

Информация о количестве полос разбиения L и количестве криволинейных прямоугольников в каждой полосе m_k используется для распределения расчетных точек по MPI-процессам [80].

Данный алгоритм был реализован в рамках описанной выше библиотеки параллельных обменов. Отличительной особенностью данной реализации является возможность присвоения точкам расчетной сетки различных весов, характеризующих относительную сложность вычислений для данного узла сетки, и применения статической балансировки вычислительной нагрузки между MPI-процессами. Балансировка вычислительной нагрузки основана на точном алгоритме бисекции [82]. Помимо двумерной декомпозиции поддерживается режим одномерной декомпозиции вдоль широтного направления. На рисунке 2.4 приведен пример разбиения, генерируемого данным алгоритмом, при использовании 100 MPI-процессов.

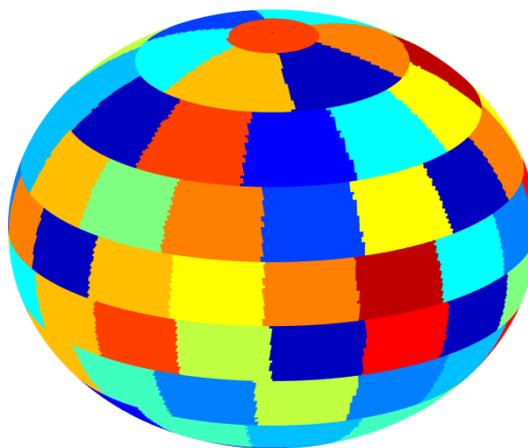


Рисунок 2.4 — Пример работы алгоритма двумерной декомпозиции области по MPI-процессам.

Для параллельной реализации предложенного многосеточного алгоритма требуется реализовать параллельные версии процедуры умножения матрицы системы на вектор, оператора сгрубления, оператора продолжения и оператора сглаживания. Рассматриваемые методы аппроксимации уравнений по пространству являются локальными, то есть для вычислений в заданной точке используются только соседние значения сеточных функций. Для вычисления операторов сгрубления и продолжения в каждой точке также требуются лишь значения сеточной функции в соседних узлах сетки. Для реализации метода

Якоби требуется только распараллеливание операции умножения матрицы исходной системы на вектор (умножение на диагональную матрицу не требует параллельных обменов). Для параллельной реализации таких процедур удобно использовать так называемый подход гало-зон. Суть подхода заключается в том, что расчетная область, принадлежащая данному MPI-процессу, расширяется таким образом, чтобы включать в себя точки, которые требуются для выполнения вычислений в точках расчетной области. Такое расширение расчетной области называют гало-зоной, точки в этих областях – гало-точками, а параллельный обмен с соседними MPI-процессами для получения значений в гало-точках – гало-обменами. Так как разностный шаблон операторов является фиксированным, ширина гало-зон, необходимых для вычислений этих операторов определяется один раз на стадии инициализации программы. После определения размеров гало-зон происходит инициализация объекта типа `exchange_t`, реализующего данный гало-обмен. Для инициализации обмена происходит поиск пересечения гало-зоны на данном MPI-процессе с расчетными областями на остальных MPI-процессах.

2.4. Численные эксперименты

В данном разделе приводятся результаты численных экспериментов, целью которых является исследование сходимости и параллельной масштабируемости предложенного многосеточного алгоритма.

2.4.1. Исследование сходимости алгоритма

Для численного исследования сходимости предложенного алгоритма рассматриваются системы уравнений, возникающие в результате дискретизации по пространству уравнения Гельмгольца и Пуассона на расчетных сетках, параметры которых приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1 — Параметры расчетных сеток, используемых для численного исследования сходимости многосеточного алгоритма.

Начальное разрешение	параметр редукиции, α	Узлов сетки
512 × 256	1	$1.3 \cdot 10^5$
	0.1	$7.2 \cdot 10^4$
	0.01	$6.6 \cdot 10^4$
1024 × 512	1	$5.2 \cdot 10^5$
	0.1	$2.8 \cdot 10^4$
	0.01	$2.6 \cdot 10^4$
2048 × 1024	1	$2.1 \cdot 10^6$
	0.1	$1.1 \cdot 10^6$
	0.01	$1.0 \cdot 10^6$
4096 × 2048	1	$8.3 \cdot 10^6$
	0.1	$4.6 \cdot 10^6$
	0.01	$4.2 \cdot 10^6$

Для построения редуцированных сеток используется алгоритм, приведенный в разделе 1.3.4.1. Для аппроксимации оператора Лапласа используется разностная схема

$$(L\psi)_j = \frac{(\delta_{\lambda\lambda}\psi)_j}{a^2 \cos^2 \varphi_j} + \frac{\cos \varphi_{j+\frac{1}{2}}(\delta_\varphi\psi)_{j+\frac{1}{2}} - \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}}(\delta_\varphi\psi)_{j-\frac{1}{2}}}{a^2 \cos \varphi_j \Delta \varphi_j}, \quad (2.21)$$

$$(\delta_{\lambda\lambda}\psi)_{i,j} = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{(\Delta\lambda_j)^2}, \quad (\delta_\varphi\psi)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{W_j^{j+1}\psi_{j+1} - \psi_j}{\Delta\varphi_{j+\frac{1}{2}}}.$$

Здесь W_j^{j+1} – интерполяционная матрица, соответствующая одномерной кусочно-кубической интерполяции.

Сходимость алгоритма исследуется для правых частей результирующей системы уравнений, полученных путем умножения случайного вектора на матрицу системы. В качестве критерия остановки используется падение относительной нормы невязки в 10^8 раз. Количество грубых уровней V-цикла многосеточного алгоритма в каждом случае выбирается вручную таким образом, чтобы максимизировать скорость сходимости метода (минимизировать количество итераций V-цикла). Количество итераций предсглаживания и постсглаживания – 4.

Результаты расчетов для решения уравнения Пуассона приведены в таблице 2.2. Приводится среднее количество итераций V-цикла N_{iter} , необходимое для

Таблица 2.2 — Исследование сходимости многосеточного метода при решении уравнения Пуассона.

Начальное разрешение	параметр редукции, α	N_{coarse}	N_{iter}
512×256	1	6	6
	0.1	5	7
	0.01	5	7
1024×512	1	7	6
	0.1	6	7
	0.01	6	7
2048×1024	1	8	6
	0.1	7	7
	0.01	7	7
4096×2048	1	9	6
	0.1	8	7
	0.01	8	7

достижения заданной точности приближенного решения системы уравнений, и используемое количество грубых уровней V-цикла алгоритма N_{coarse} . Отметим, что при решении уравнения Пуассона, для поддержания скорости сходимости метода, количество грубых уровней должно увеличиваться по мере повышения разрешения сетки. Результаты расчетов показывают, что предложенный метод обладает высокой скоростью сходимости, практически независимой от разрешения и степени редукции сетки. Во всех случаях для достижения заданной точности достаточно использовать 6-7 итераций метода.

Перейдем к исследованию сходимости метода при решении уравнения Гельмгольца. Результирующую систему уравнений можно записать в виде $(I - c^2L)x = b$. В разделе 2.1 было показано, что для модельной задачи число обусловленности результирующей системы уравнений будет зависеть от числа Куранта для фазовой скорости распространения гравитационных волн. Для исследования сходимости константа c в системе уравнений $(I - c^2L)x = b$ подбирается таким образом, чтобы величина $\frac{c}{\Delta_{eq}} \approx 6$ при каждом разрешении сетки, где Δ_{eq} — размер шага сетки в км вблизи экватора. Такое "изменение" решаемого уравнения при каждом разрешении соответствует тому, что характерное число Куранта для фазовой скорости распространения гравитационных волн вблизи экватора фиксируется равным 6 (вблизи полюсов может быть значительно

больше), что является типичным значением для глобальных моделей динамики атмосферы, использующих полунеявный метод интегрирования по времени.

Таблица 2.3 – Исследование сходимости многосеточного метода при решении уравнения Гельмгольца.

Начальное разрешение	параметр редукции, α	N_{coarse}	N_{iter}	DOFs coarse
512 × 256	1	6	7	120
	0.1	3	6	1200
	0.01	2	6	4185
1024 × 512	1	7	6	136
	0.1	4	7	1205
	0.01	2	7	16654
2048 × 1024	1	8	7	144
	0.1	5	7	1212
	0.01	2	6	66413
4096 × 2048	1	9	6	160
	0.1	6	6	1212
	0.01	3	6	66378

Результаты расчетов приведены в таблице 2.3, здесь "DOFs coarse" – количество узлов сетки на самом грубом уровне V-цикла. Из результатов расчетов видно, что, во-первых, предложенный метод обладает высокой скоростью сходимости, не зависящей от разрешения и конфигурации редуцированной сетки. Во-вторых, при увеличении степени редукции сетки (уменьшении значения параметра редукции α) для достижения максимальной скорости сходимости достаточно меньшего количества уровней V-цикла. Это связано с тем, что при увеличении степени редукции, увеличивается и минимальное значение размера шага сетки по пространству, а значит (как уже было показано ранее) уменьшается число обусловленности системы. Таким образом, использования нескольких уровней V-цикла достаточно для достижения высокой скорости сходимости метода. Этот факт является важным с точки зрения масштабируемости данного алгоритма, так как параллельная эффективность многосеточного метода, как правило, уменьшается на грубых уровнях V-цикла [25].

2.4.2. Исследование масштабируемости алгоритма

Все тесты проводились на суперкомпьютерной системе Cray XC40, установленной в Главном вычислительном центре Росгидромета. Эта система использует интерконнект Cray ARIES, каждый узел состоит из двух процессоров Intel Xeon E2697v4 с 18 ядрами, то есть 36 процессорных ядер на узле. Для компиляции исходного кода модели используется Intel Fortran compiler. Для проведения тестов максимально доступно 128 узлов кластера, что составляет 4608 вычислительных ядер.

Для того чтобы максимально приблизить структуру решаемых упрощенных уравнений к структуре трехмерных уравнений, предлагается производить одновременное решение набора двумерных уравнений, количество которых – аналог количества вертикальных уровней модели атмосферы

$$(I - c_l^2 L)x_l = b_l, \quad l = 1 \dots L. \quad (2.22)$$

Такой вид уравнений полностью совпадает с уравнениями, возникающими при использовании полунейвного подхода для дискретизации по времени гидростатических уравнений атмосферы. Аналогичные уравнения возникают и при дискретизации негидростатических уравнений за исключением того, что оператор уравнения в этом случае содержит производные по вертикали. Это не влияет на параллельную реализацию алгоритма, так как в моделях атмосферы, как правило, не используется декомпозиция расчетной области по MPI-процессам вдоль вертикального направления.

Исследование масштабируемости проводится с использованием трех вариантов вычислительных сеток: R512L30, R1024L30, R2024L30. Число после R в обозначении сетки обозначает количество узлов сетки вдоль экватора, число после L обозначает число вертикальных уровней расчетной сетки (количество одновременно решаемых двумерных уравнений). Редуцированная сетка строится таким образом, что количество узлов сетки вдоль долготы на околополюсной широте равно 16. Горизонтальное пространственное разрешение этих сеток вблизи экватора приблизительно равно 80, 40 и 20 километров соответственно. Количество узлов сетки равно $2.9 \cdot 10^6$, $1.2 \cdot 10^7$, $4.7 \cdot 10^7$ соответственно.

В качестве критерия остановки используется падение нормы невязки в 10^5 раз, применяется 3 уровня грубых сеток.

На рисунке 2.5 приведен график сильной масштабируемости многосеточного метода, то есть зависимость среднего времени решения системы уравнений от количества используемых процессорных ядер. Для всех конфигураций сеток наблюдаются участки сверхлинейного ускорения, что, по-видимому, обусловлено увеличением эффективности использования кэш-памяти процессора при уменьшении количества узлов сетки, приходящихся на один MPI-процесс. Для самой грубой сетки R512L30 наблюдается ускорение вплоть до 1152 ядер, что соответствует использованию 81 узла горизонтальной сетки на каждом процессорном ядре. При использовании сетки R2048L30 наблюдается ускорение по меньшей мере до 4608 ядер. Вероятно, в этой конфигурации можно эффективно использовать большее количество ядер, но на момент проведения тестирования было доступно только 4806 ядер. Также были произведены замеры времени выполнения вычислений на каждом уровне многосеточного метода для задачи на сетке R512L30. Данные замеры показали, что потеря параллельной эффективности в основном обусловлена масштабируемостью на самом грубом уровне. Уменьшение параллельной эффективности на грубых уровнях, возникает по двум причинам: уменьшением количества узлов сетки, приходящихся на процессорное ядро, и дисбаланс вычислительной нагрузки. Дисбаланс нагрузки связан с использованием метода условного сгрубления сетки, так как вблизи экватора количество узлов сетки уменьшается быстрее, чем вблизи полюсов.

2.5. Основные результаты главы

В данной главе рассматривался вопрос построения масштабируемого метода решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих в результате дискретизации эллиптических уравнений на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере. В качестве такого алгоритма был предложен геометрический многосеточный метод, основанный на применении модификации метода условного сгрубления сетки и равномерного распределения точек грубой сетки по долготе. В рамках модельных двумерных уравнений на сфере было проведено исследование скорости сходимости и масштабируемости пред-

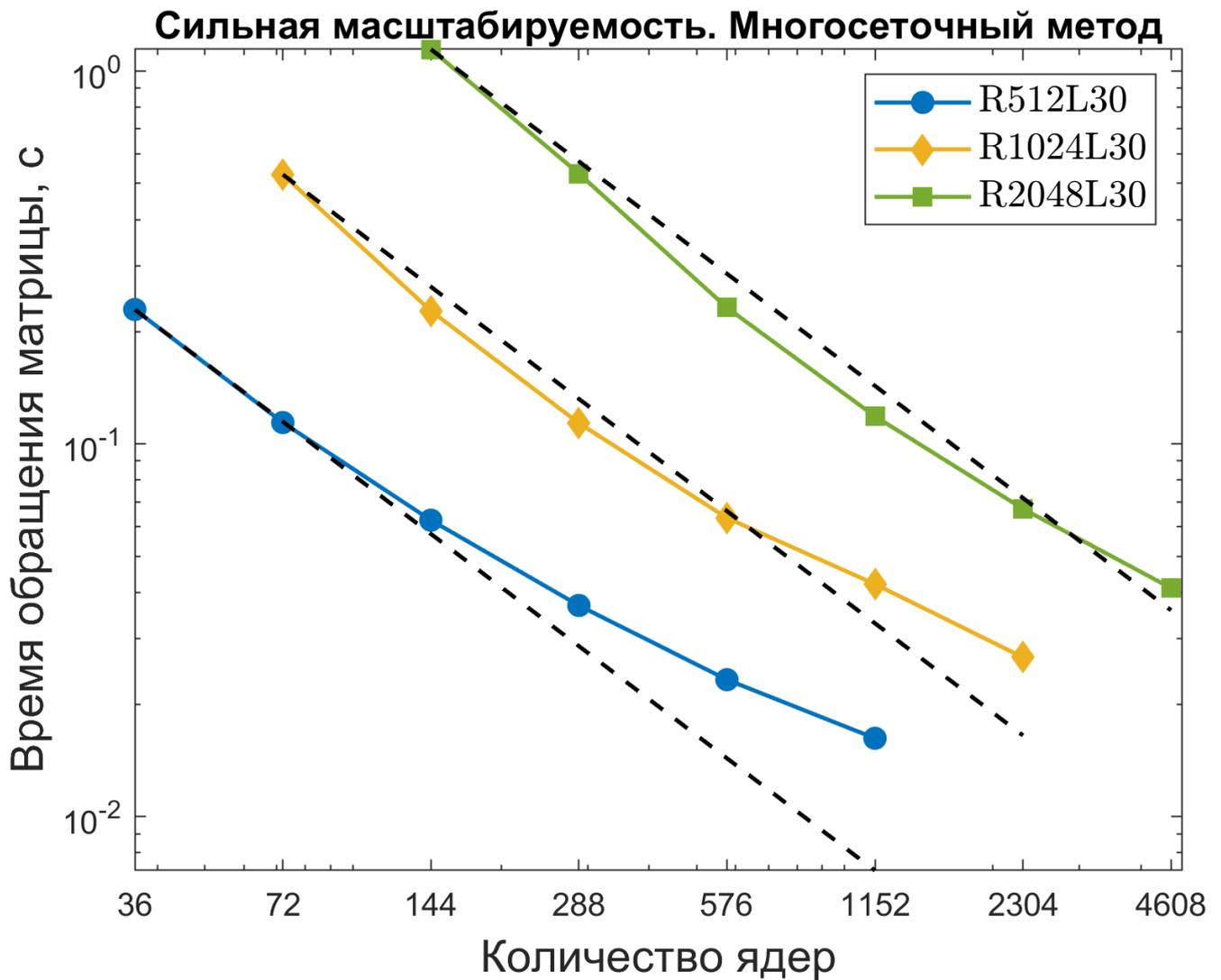


Рисунок 2.5 — График сильной масштабируемости многосеточного метода. На графике приведена зависимость среднего времени решения системы уравнений от количества используемых процессорных ядер.

ложенного метода. Численные эксперименты показали, что предложенный метод обладает высокой скоростью сходимости, которая не зависит от разрешения и конфигурации редуцированной широтно-долготной сетки. Замеры масштабируемости алгоритма показали, что при использовании сетки с пространственным разрешением около 20 километров предложенный метод эффективно масштабируется как минимум до 4608 процессорных ядер.

Глава 3. Повышение параллельной и вычислительной эффективности глобальной модели атмосферы ПЛАВ

ПЛАВ – отечественная глобальная гидростатическая модель атмосферы, разработанная в Институте вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН и Гидрометцентре России [83]. Данная модель состоит из оригинального динамического ядра [4] и блока параметризаций физических процессов подсеточного масштаба, в основном разработанных консорциумом ALADIN/LACE [84]. Для расчетов коротковолнового и длинноволнового излучения атмосферы в модели ПЛАВ используются известные пакеты программ CLIRAD-SW [85; 86] и RRTMG LW [87]. Гидростатическое динамическое ядро модели ПЛАВ основано на применении полунеявного полулагранжевого подхода, используемом во многих оперативных моделях численного прогноза погоды [21]. Отличительными особенностями данного динамического ядра являются использование вертикальной составляющей абсолютной завихренности и горизонтальной дивергенции на неразнесенной редуцированной широтно-долготной сетке в качестве прогностических переменных и применение метода конечных разностей высокого порядка. Краткое описание алгоритмов, используемых в блоке динамики модели ПЛАВ, и их параллельной реализации приведены в Приложении А. Более полное и подробное описание приведено в работах [4; 28].

Существует несколько конфигураций модели ПЛАВ, имеющих различное пространственное разрешение, каждая из которых ориентирована на конкретное приложение (детерминистический среднесрочный прогноз погоды, ансамблевый прогноз погоды, моделирование климата ...). Для оперативного среднесрочного прогноза погоды применяется версия с горизонтальным разрешением 0.225 градуса по долготе и переменным разрешением по широте от 0.24 градуса в южном полушарии до 0.16 градуса в северном. Это около 20 км в северных средних широтах. Вертикальная сетка данной версии имеет 51 уровень. Количество узлов сетки данной версии 1600x866x51. Версия модели с горизонтальным разрешением 0.72x0.9 градуса по широте и долготе соответственно и 96 уровней по вертикали (количество узлов сетки 400x251x96) используется в системе долгосрочного вероятностного прогноза Гидрометцентра России а также для ансамблевых прогнозов и моделирования современного состояния климата [88; 89]. Эта версия модели в средних широтах имеет пространственно разрешение

порядка 75 километров. На данный момент также разрабатывается перспективная версия модели для оперативного среднесрочного прогноза погоды с горизонтальным разрешением над территорией России порядка 10 километров и 104 уровнями по вертикали (разрешение сетки 3600x1946x104). Обозначенные выше конфигурации модели ПЛАВ в дальнейшем будут обозначаться как "70 км", "20 км" и "10 км" версии модели.

Как было отмечено ранее, одной из характерных особенностей задачи численного моделирования динамики атмосферы является высокая требовательность к вычислительным ресурсам, обусловленная необходимостью использования как можно более подробных пространственных сеток и сложностью решаемых трехмерных нестационарных уравнений с громоздкими правыми частями, описывающими адиабатические процессы. Ситуация осложняется тем, что каждое из перечисленных выше практических приложений имеет свои особенности, накладывающие дополнительные требования к вычислительным ресурсам: оперативный прогноз погоды должен вычисляться за ограниченное время (обычно до 15 минут на модельные сутки), климатические расчеты требуют интегрирования модели на многие десятилетия вперед, ансамблевый прогноз предполагает многократное проведение расчетов (современные системы используют порядка 60-100 членов ансамбля).

В данной главе диссертации приводится описание проведенных автором работ, целью которых является повышение параллельной и вычислительной эффективности программного комплекса глобальной модели атмосферы ПЛАВ.

Основные результаты данной главы представлены в работах [4; 27; 28; 30; 32; 33].

Данная глава включает четыре раздела. В разделе 3.1 представлено внедрение в модель ПЛАВ полулагранжевого алгоритма с динамической адаптацией параллельных обменов. В разделе 3.2 приведено описание работ по внедрению в модель ПЛАВ вычислений и обменов с использованием чисел с плавающей точкой одинарной точности. В разделе 3.3 представлены модификации кода модели ПЛАВ нацеленные на оптимизацию работы с памятью процессора. В разделе 3.4 приведен обзор основных результатов данной главы.

3.1. Реализация полулагранжева алгоритма с адаптацией параллельных обменов

В глобальной модели атмосферы ПЛАВ полные производные по времени аппроксимируются с использованием полулагранжева подхода [16]. Суть данного подхода заключается в том, что узлы расчетной сетки на каждом шаге по времени рассматриваются как конечные точки траекторий лагранжевых частиц воздуха. Таким образом алгоритм полулагранжевой адвекции состоит из двух основных блоков:

- расчет обратных по времени траекторий, то есть положений частиц воздуха, конечной точкой траекторий которых является узел расчетной сетки на следующем шаге по времени;
- пространственная интерполяции переносимых величин в начальные точки траекторий этих частиц.

Параллельная реализация данного алгоритма на архитектурах с распределенной памятью требует выполнения так называемых гало обменов, то есть параллельных обменов между MPI-процессами значениями величин в узлах расчетной сетки, которые не принадлежат данному процессу, но требуются для выполнения расчетов в узлах, принадлежащих данному MPI-процессу. В случае применения одномерной MPI-декомпозиции вдоль широты, это приводит к необходимости выполнения параллельных обменов широтными полосами, прилегающими к границам расчетной области MPI-процесса с шириной, определяемой положением самой дальней начальной точки траектории и пространственным шаблоном интерполяционной процедуры. Под шириной обмена имеется ввиду количество широтных полос.

Ширина обменов в полулагранжевом блоке в исходной версии модели является постоянной предзаданной величиной и рассчитывается на основе глобальной оценки максимального значения меридиональной компоненты вектора скорости ветра v_{\max} , шага интегрирования по времени модели Δt и полуширины интерполяционного шаблона вдоль меридионального направления K_{interp}

$$K_{SL} = \left\lfloor \frac{|v_{\max}| \Delta t}{a \Delta \varphi} \right\rfloor + K_{interp}. \quad (3.1)$$

Здесь $\lfloor \cdot \rfloor$ - функция выделения целой части действительного числа с округлением до ближайшего целого в меньшую сторону. Эта априорная оценка является

верхним пределом ширины параллельного обмена, которая может потребоваться для расчетов, при условии что в рамках интегрирования модели не реализуются меридиональные скорости ветра выше скорости v_{\max} . Таким образом, полулагранжев блок адвекции в стандартной версии модели требует обмена значениями компонент скорости ветра и переносимых величин фиксированной предопределенной ширины K_{SL} . Для полулагранжевых моделей атмосферы $K_{SL} \sim 6 - 10$. Такая оценка для области параллельной зависимости является довольно грубой, а фактически для вычислений может требоваться гораздо меньшее количество данных, лежащих за пределами расчетной области данного MPI-процесса, особенно в регионах с малой скоростью ветра. Данная ситуация схематично проиллюстрирована на Рисунке 3.1.

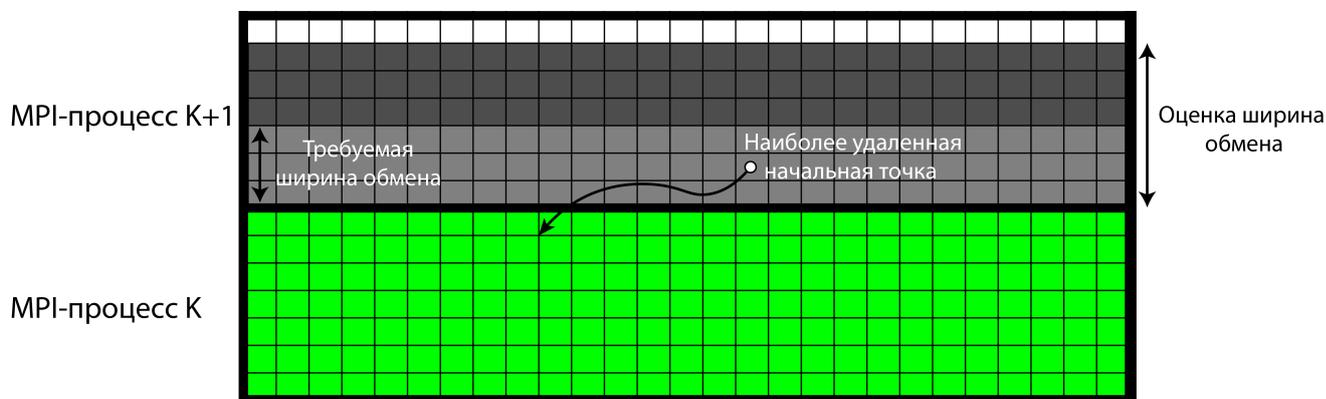


Рисунок 3.1 — Схематичное изображение ширины гало обмена в полулагранжевом блоке при использовании априорной оценки K_{SL} (темно-серый цвет) и оценки основанной на определении положения самой дальней начальной точки траектории (серый цвет).

При использовании одномерной декомпозиции по MPI-процессам, размер сообщений не уменьшается с увеличением числа вычислительных ядер, более того, увеличивается число количество MPI-процессов, с которыми требуется произвести обмен, что негативно сказывается на параллельной эффективности модели. Для уменьшения объема параллельных обменов в полулагранжевом блоке адвекции предлагается следующая модификация параллельной структуры алгоритм.

1. Производится расчет обратных начальных точек траекторий лагранжевых частиц на данном шаге по времени. Для этого выполняется обмен значений компонент скорости ветра с априорной оценкой ширины гало обмена K_{SL} .

2. Зная координаты начальных точек траекторий частиц для расчетных точек данного MPI-процесса, вычисляется новая оценка ширины обменов.
3. Между MPI-процессами, участвующими в параллельном обмене из пункта 1, производится обмен информацией (2 числа) о новой оценке ширины обменов для каждого MPI-процесса. На основе этой информации формируется профиль нового гало обмена.
4. Выполняется гало обмен значениями адвектируемых сеточных полей.
5. Производится интерполяция значений адвектируемых полей в начальные точки поулагранжевых траекторий.

Применение данного подхода позволяет существенно сократить средний размер сообщений, задействованных в этих обменах.

3.1.1. Численные эксперименты

Для тестирования эффекта от внедрения описанных выше модификаций рассматривается две конфигурации модели ПЛАВ. Обе конфигурации имеют одинаковое горизонтальное разрешение 0.119 градуса (примерно 13 км по экватору), первая конфигурация имеет 51 уровень по вертикали, а вторая – 126 уровней по вертикали. Размеры сетки составляют 3024x1513x51 и 3024x1513x126 соответственно. Версия с 51 вертикальным уровнем имеет такое же разрешение, какое использовалось для предварительных замеров масштабируемости кода до описанных выше модификаций.

Все эксперименты проводились на вычислительной системе Cray XC40, установленной в Главном Вычислительном Центре Росгидромета, конфигурация которой была описана в подразделе 2.4.2.

Сначала, были произведено сравнение параллельной эффективности модифицированного кода модели ПЛАВ с предыдущей версией модели с использованием до 9072 процессорных ядер. Результаты данного сравнения показаны на Рисунке 3.2. Стоит обратить внимание, что параллельная эффективность кода (отношение достигнутого ускорения по сравнению с линейным) увеличилась примерно на 15% при использовании 9072 ядер, с 45.5% до 60%. Кроме этого мы видим, что параллельная эффективность новой версии модели превосходит

старую версию модели на всем исследуемом диапазоне количества вычислительных ядер.

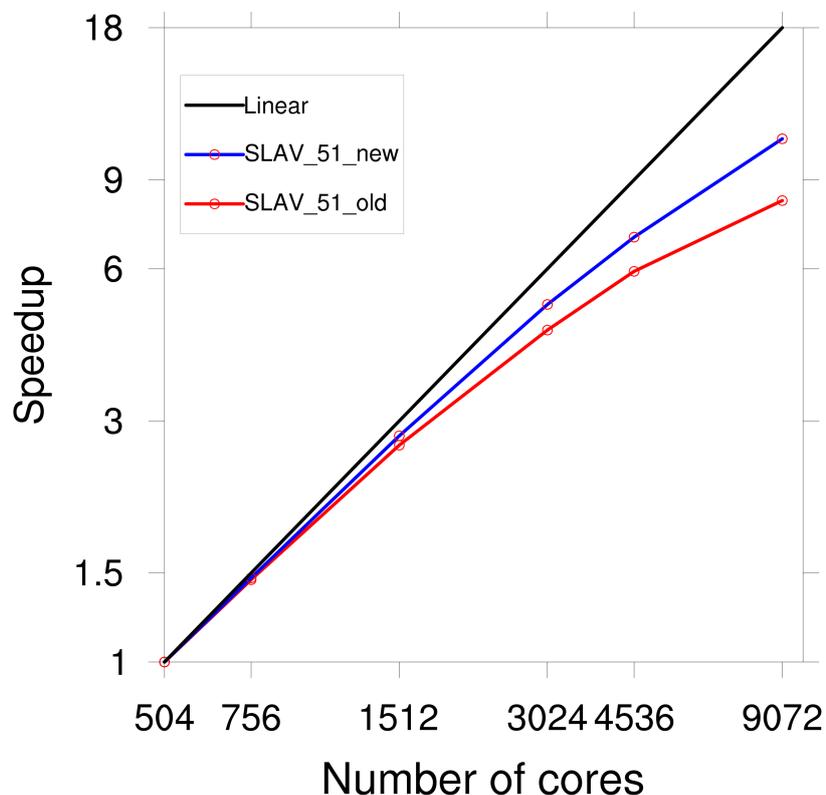


Рисунок 3.2 — Сильная масштабируемость (ускорение времени расчета по отношению к времени расчета с использованием 504 вычислительных ядер) кода модели ПЛАВ (версия с 51 вертикальным уровнем): версия до модификации (красная кривая), новая версия (синяя кривая), линейное ускорение (черная кривая).

Также были проведены замеры сильной масштабируемости новой версии модели с тем же горизонтальным разрешением, но с 126 вертикальными уровнями. Результаты представлены на Рисунке 3.3. Результаты представлены для количества вычислительных ядер в диапазоне от 504 до 13608, при этом код модели ПЛАВ способен работать и с использованием 27216 вычислительных ядер, однако параллельное ускорение составляет только 20% по сравнению с временем расчета на 13608 ядрах. Таким образом показано, что код модели ПЛАВ

в данной конфигурации достигает параллельной эффективности около 53% при использовании 13608 процессорных ядрах.

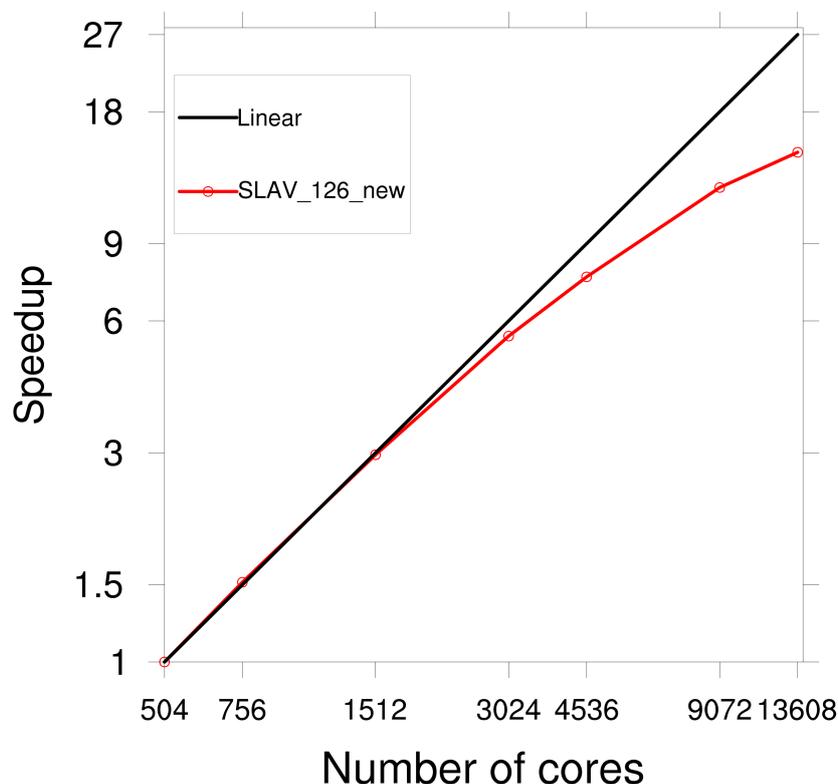


Рисунок 3.3 — Сильная масштабируемость (ускорение времени расчета по отношению к времени расчета с использованием 504 вычислительных ядер) новой версии кода модели ПЛАВ (версия с 126 вертикальным уровнем): ускорение модели (синяя кривая), линейное ускорение (черная кривая).

Также были произведены расчеты параллельной эффективности различных блоков конфигурации модели с 126 вертикальными уровнями в зависимости от числа процессорных ядер. Результаты показаны на Рисунке 3.4. На Рисунке 3.5 показана доля затраченного расчетного времени для различных частей кода модели в зависимости от количества вычислительных ядер. На Рисунках 3.4 и 3.5 «dynamic» обозначает все вычисления в динамическом ядре, за исключением полулагранжевой адвекции и блока решения уравнения Гельмгольца, восстановления поля горизонтальной скорости ветра и горизонтальной

гипердиффузии; «subgrid param» обозначает блок расчета параметризаций подсеточного масштаба (коротковолновое и длинноволновое излучение, глубокая и мелкая конвекция, пограничный слой, гравитационное волновое сопротивление, микрофизика и др.), «SL_advection» относится к блоку полулагранжевой адвекции, «elliptic solver» соответствует вышеупомянутым решателям в пространстве Фурье.

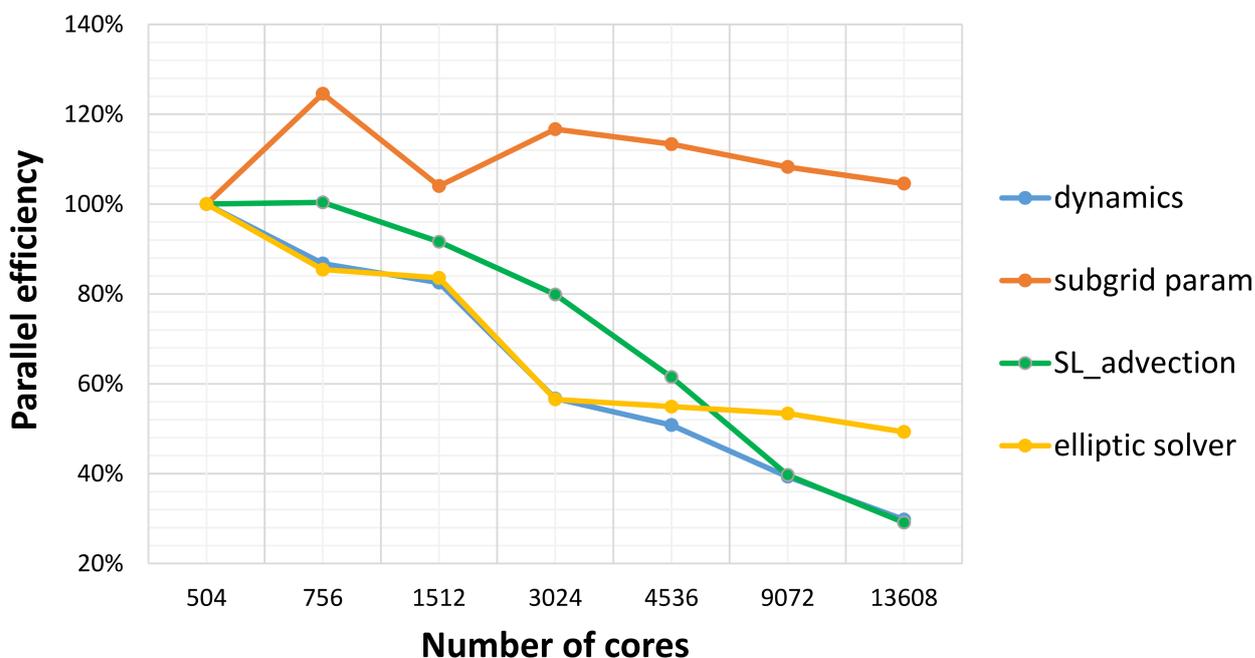


Рисунок 3.4 — Параллельная эффективность различных блоков кода модели ПЛАВ в зависимости от количества вычислительных ядер. Описание блоков приведено в тексте.

Видно, что вычисления параметризаций хорошо масштабируются. Этого можно было ожидать, так как большинство этих вычислений включают в себя независимые вычисления только в вертикальных столбцах. Также для этого блока наблюдается сверхлинейное ускорение, что можно объяснить более эффективным использованием кэш-памяти при увеличении количества процессоров. Для других частей модели параллельная эффективность постепенно уменьшается с ростом количества вычислительных ядер. Блоки «SL_advection» и «dynamics», по-видимому, являются узкими местами параллельной реализации текущей версии модели. Это, с одной стороны, связано со свойствами одномерной декомпозиции по MPI-процессам, поскольку объем сообщений в параллельных обменах не уменьшается при увеличении числа процессов (как это происходит при использовании двумерной декомпозиции). Другая причина -

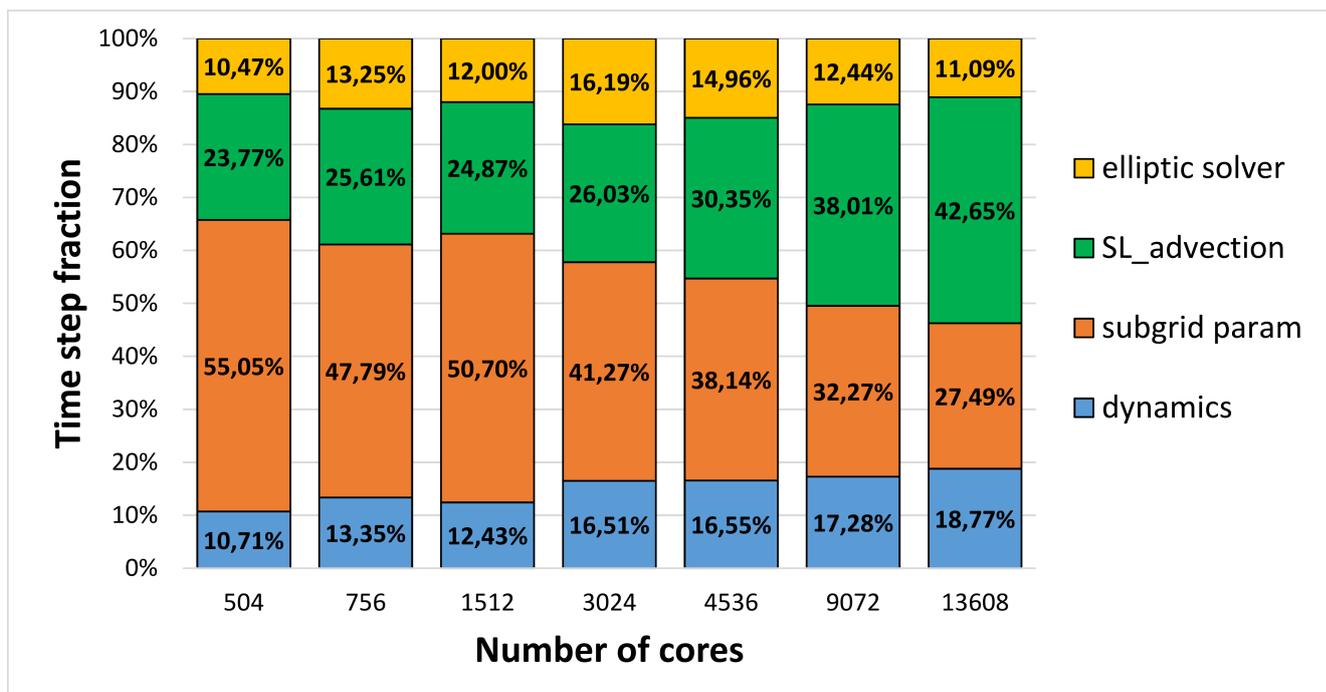


Рисунок 3.5 — Доля затраченного расчетного времени для различных блоков кода модели ПЛАВ в зависимости от количества вычислительных ядер.

Описание блоков приведено в тексте.

ограниченная масштабируемость OpenMP-распараллеливания. Так, лучшая конфигурация модели с точки зрения времени выполнения шага интегрирования по времени для 504 вычислительных ядер - это 6 потоков (нитей) OpenMP и 84 MPI-рангов, тогда как использование 18 потоков является оптимальным при использовании более 1512 ядер. Потеря параллельной эффективности в этих блоках, таким образом, частично связано с потерей параллельной эффективности OpenMP-распараллеливания. Из экспериментов также видно, что глобальная транспозиция данных, являющаяся частью алгоритма решения уравнений эллиптического типа, не является основной причиной уменьшения параллельной эффективности модели для исследуемой конфигурации, как это считалось ранее. Однако применение транспозиций не позволяет эффективно реализовать двумерную декомпозицию в модели ПЛАВ.

3.2. Внедрение вычислений и параллельных обменов с использованием чисел с плавающей точкой одинарной точности

В численном прогнозе погоды и моделировании климата всегда присутствуют неустраняемые погрешности. Источниками этих погрешностей может являться неточность определения начального состояния атмосферы (практически невозможно абсолютно точно измерить параметры атмосферы в каждом узле расчетной сетки), погрешности, связанные с аппроксимацией исходных уравнений динамики атмосферы (сюда входят как ошибки приближенного вычисления дифференциальных операторов, так и ошибки параметризации физических процессов подсеточного масштаба), ошибки округления и представления чисел при использовании арифметики с плавающей точкой. Можно предположить, что в ряде случаев, погрешности округления вносят незначительный вклад в общую неопределенность по сравнению с другими источниками. В то же время, избирательное использование одинарной или даже половинной точности вместо двойной точности, обычно используемой в численном прогнозе погоды для вычислений и параллельных коммуникаций, может значительно сократить требуемые компьютерные ресурсы. Это важно, поскольку численный прогноз погоды и моделирование климата являются очень требовательными к вычислительным ресурсам приложениями, требующими использования тысяч процессорных ядер для проведения расчетов.

К настоящему времени имеется ряд теоретических [90; 91] и практических исследований [92–96], посвященных возможности использования пониженной точности для моделирования динамики атмосферы. Например, опыт Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды с глобальной моделью динамики атмосферы IFS (Integrated Forecast System) [93; 94] показывает, что использование одинарной точности может сэкономить до 40% времени без заметного влияния на точность среднесрочного ансамблевого прогноза погоды. Таким образом, мы рассматриваем использование одинарной точности как один из возможных подходов к увеличению вычислительной и параллельной эффективности модели ПЛАВ.

3.2.1. Внедрение одинарной точности в блок полулагранжевой адвекции

Одним из наиболее затратных с точки зрения вычислительного времени блоков в модели ПЛАВ является блок полулагранжевой адвекции. В предыдущем разделе было показано, что для модели ПЛАВ высокого разрешения на блок полулагранжевой адвекции в зависимости от количества используемых процессорных ядер приходится от 25% до 40% расчетного времени. Кроме того этот блок масштабируется хуже других блоков модели. В среднем около половины этого времени тратится на фазу параллельного обмена и около трети на расчет начальных точек траекторий и интерполяцию значений сеточных функций в эти точки.

Алгоритм полулагранжевой адвекции [21] позволяет использовать довольно большие шаги интегрирования по времени, обычно в 5-10 раз превышающие шаги Эйлеровых явных схем, которые определяются условием устойчивости Куранта. Это позволяет выбирать шаг по времени из соображений точности, а не устойчивости алгоритма, что заметно повышает вычислительную эффективность всей модели.

Практическая реализация этого алгоритма в рамках модели ПЛАВ организована следующим образом.

1. Вычисляются значения правых частей уравнений, которые затем будут проинтерполированы в начальные точки полулагранжевых траекторий. Для хранения этих значений используется один массив RB4, имеющий размерности $(N_i, NFLDB4 \cdot (NLEV + 1), N_j)$. Здесь N_i определяется размерностью сетки вдоль долготы, $NFLDB4$ – количество адвектируемых полей (порядка 20-30 полей в зависимости от конфигурации модели), $NLEV$ – количество вертикальных уровней модели, N_j определяется количеством узлов сетки вдоль широты, приходящихся на данный MPI-процесс. Такая организация хранения данных позволяет производить MPI-обмен, необходимый для выполнения интерполяции без использования промежуточных буферных массивов.
2. Выполняется параллельный обмен значениями массива RB4 (обмены значениями на широтных полосах, примыкающих к границам расчетной области MPI-процессов) с шириной, определяемой положением

самой дальней начальной точкой полулагранжевых траекторий.

3. Рассчитываются координаты начальных точек полулагранжевых траекторий, производится интерполяция значений массива RB4 в эти точки.

С учетом того, что большая часть расчетного времени данного блока приходится на выполнение параллельного обмена, предлагается внедрить возможность использования одинарной точности для выполнения параллельного обмена и хранения значений массива RB4. Использование одинарной точности позволяет вдвое уменьшить размер передаваемых данных и снижает нагрузку на память при вычислениях. Чтобы реализовать возможность переключения между двойной и одинарной точностью хранения массива RB4, используется встроенный функционал языка Fortran, который позволяет на момент компиляции программы определять параметр точности хранения данных и тип передаваемых значений в MPI-коммуникациях:

```
integer, parameter :: rb4_wp = kind(1.0_4)
integer, parameter :: rb4_exch_type = mpi_real4
real(kind=rb4_wp), allocatable :: RB4(:, :, :)
```

В приведенном выше примере исходного кода `rb4_wp` – параметр, определяющий тип значений массива RB4, `rb4_exch_type` – параметр, определяющий тип передаваемых значений в ходе выполнения MPI-обмена значениями массива RB4. Такая реализация позволяет при необходимости переключаться между использованием одинарной и двойной точности изменяя значения параметров `rb4_wp` и `rb4_exch_type`.

3.2.2. Внедрение одинарной точности в блок решения эллиптических уравнений

В модели ПЛАВ на каждом шаге по времени необходимо решать набор эллиптических уравнений. А именно, уравнение Гельмгольца, возникающее вследствие применения полунявной схемы интегрирования по времени, задача

восстановления горизонтальной скорости ветра из полей относительной завихренности и дивергенции, неявная дискретизация уравнения гипердиффузии. Алгоритм решения этих уравнений основан на использовании быстрых преобразований Фурье по долготам и блочного алгоритма прогонки. Практическая реализация этого метода включает в себя процедуру параллельной транспозиции данных (описание приведено в Приложении А), которая фактически представляет собой глобальное перераспределение данных между процессами и требует параллельного взаимодействия типа "каждый-с-каждым". Один из возможных способов оптимизировать фазу параллельной транспозиции данных в этом блоке – использовать одинарную точность для буферных массивов, используемых при выполнении MPI-обменов, тем самым вдвое уменьшая размер передаваемых данных. Реализация этих изменений требует только локальных модификаций исходного кода модели в рамках модуля параллельной транспозиции данных. Аналогично случаю использования одинарной точности в полулагранжевом блоке вводится параметр точности буферных массивов и параметр типа данных обмена MPI, позволяющий при необходимости переключаться между одинарной и двойной точностью.

```
integer(kind=4), parameter :: buf_wp = kind(1.0_4)
integer(kind=4), parameter :: mpi_wp = mpi_real4
real(kind=buf_wp), allocatable :: rbufin(:, :), rbufout(:, :)
```

В приведенном выше примере исходного кода `rbufin`, `rbufin` – буферные, используемые для выполнения MPI-коммуникаций, `buf_wp` – параметр, определяющий тип значений этих массивов, `mpi_wp` – параметр, определяющий тип передаваемых значений в ходе выполнения MPI-обмена значениями массивов `rbufin`, `rbufin`. При необходимости можно переключаться между использованием одинарной и двойной точности изменяя значения параметров `buf_wp` и `mpi_wp`.

3.2.3. Численные эксперименты

Для оценки влияния описанных в данном разделе модификаций на производительность и точность модели, рассматриваются численные эксперименты с

тремя основными конфигурациями модели ПЛАВ – 70 км версия, используемая для долгосрочных, климатических и ансамблевых расчетов, 20 км версия, используемая для оперативного среднесрочного прогноза погоды и 10 км версия – перспективная версия модели для оперативного прогноза погоды. Важно, чтобы вносимые изменения не приводили к ухудшению метрик качества прогноза для всех рассматриваемых приложений.

3.2.3.1. Замеры ускорения модели

Были произведены замеры времени расчетов для блока полулагранжевой адвекции и блока решения эллиптических уравнений для исходной версии кода моделии новой версии, использующей одинарную точность в этих блоках. Все эксперименты проводились на вычислительной системе Cray XC40, установленной в Главном Вычислительном Центре Росгидромета. Описание данной вычислительной системы приведено в разделе 2.4.2. Для расчетов с 70 км версией модели ПЛАВ используется 8 вычислительных узлов (256 процессорных ядер) с 8 MPI-процессами и 4 OpenMP нитями на каждом узле. Для 20 км версии используется 27 вычислительных узлов (864 процессорных ядер) с такой же конфигурацией MPI-OpenMP. Для экспериментов с 10 км версией модели используется конфигурация с 108 вычислительными узлами (3888 процессорных ядер) и 6 MPI-процессов и OpenMP нитей на каждом узле.

3.2.3.2. Среднесрочный прогноз погоды

Для оценки влияния внедрения одинарной точности на качество воспроизведения динамики атмосферы рассматривается задача прогноза погоды с заблаговременностью 120 часов. Для расчетов используется версия модели ПЛАВ с горизонтальным разрешением 1600×865 точек и 51 уровнями по вертикали. Производится сравнение конфигурации модели, использующей одинарную точность в блоках полулагранжевой адвекции и решения эллиптических уравне-

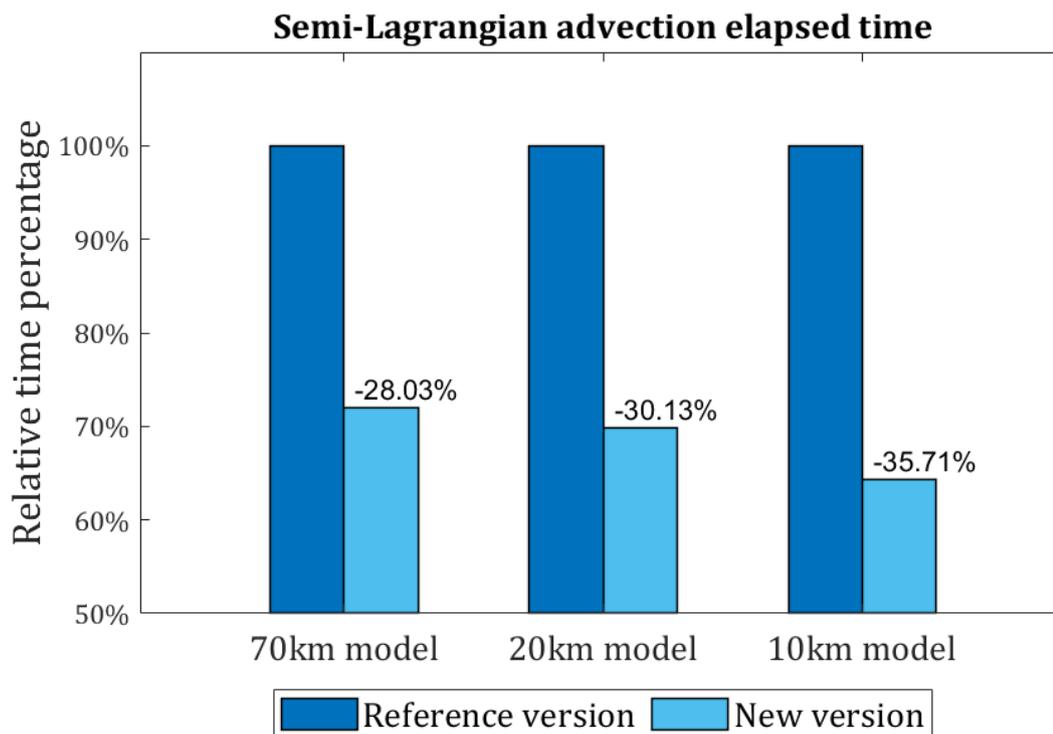


Рисунок 3.6 — Изменение среднего времени выполнения расчетов в блоке полулагранжевой адвекции для модели ПЛАВ с разрешением 10 км, 20 км и 70 км после внедрения одинарной точности по сравнению с исходной версией. Цифры над столбцами показывают уменьшение времени в процентах по сравнению с исходной версией кода.

ний, с эталонной версией модели ПЛАВ, использующая вычисления с двойной точностью в этих блоках.

В качестве начальных условий для расчета прогноза погоды на 120 часов используется оценка состояния атмосферы земли по данным оперативного анализа Гидрометцентра России. Был проведен расчет серии 120-часовых прогнозов погоды с начальными данными от 00 часов всемирного скоординированного времени для каждого дня Января 2020 года. Для данной серии прогнозов были рассчитаны стандартные меры ошибки прогноза в соответствии со стандартом Всемирной метеорологической организации [97]. Эти показатели включают среднюю ошибку (смещение) и среднеквадратическую ошибку. Все показатели рассчитываются для всех стандартных регионов вместе с соответствующими доверительными интервалами. На рисунках 3.8 и 3.9 показаны показатели для наиболее отклоняющихся величин, в то время как другие регионы и показатели показывают меньшие различия. Из рисунков видно, что введение вычислений

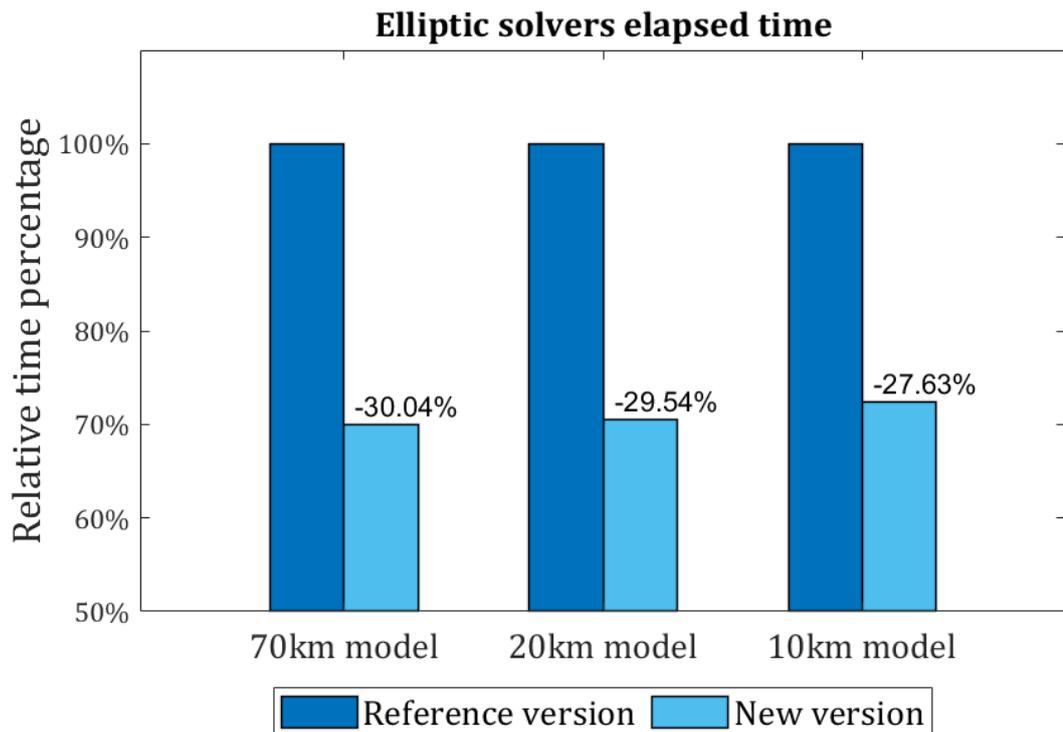


Рисунок 3.7 — Аналогично Рисунку 3.6, но для блока решения эллиптических уравнений.

одинарной точности в блок полулагранжевой адвекции и транспозиций данных не меняет метрик ошибки прогноза в пределах статистической значимости.

3.2.3.3. Влияние применения одинарной точности на качество воспроизведения климата

В рамках совместной работы [27], Р.Ю. Фадеевым был проведен ряд численных экспериментов, целью которых было исследование влияние одинарной точности на качество воспроизведения климата в модели ПЛАВ. Эксперименты проводились с моделью ПЛАВ с горизонтальным разрешением 0.72 на 0.9 градуса по широте и долготе соответственно и 96 уровнями по вертикали. Рассматривались следующие версии модели ПЛАВ: версия с использованием одинарной точности в блоках полулагранжевой адвекции и решения эллиптических уравнений и эталонная версия с вычислениями двойной точности в соответствующих частях. Сравнивались осредненные за 5 лет интегрирования

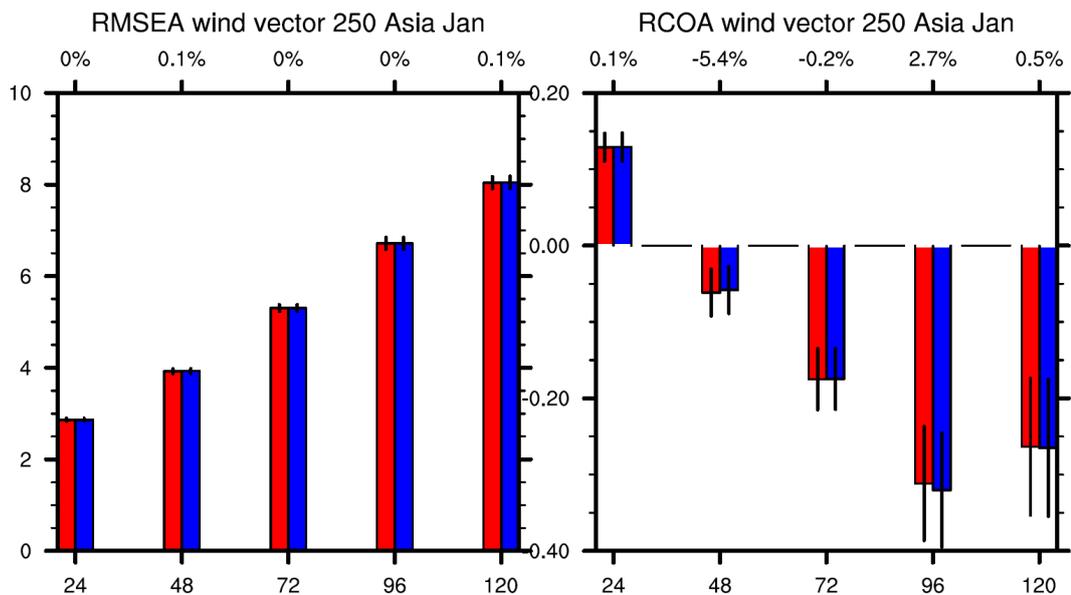


Рисунок 3.8 – Среднеквадратическая ошибка (RMSEA) и средняя ошибка (RCOA) для вектора скорости ветра на поверхности 250 гПа в регионе Азия. Черные линии в середине каждого столбца показывают доверительные интервалы.

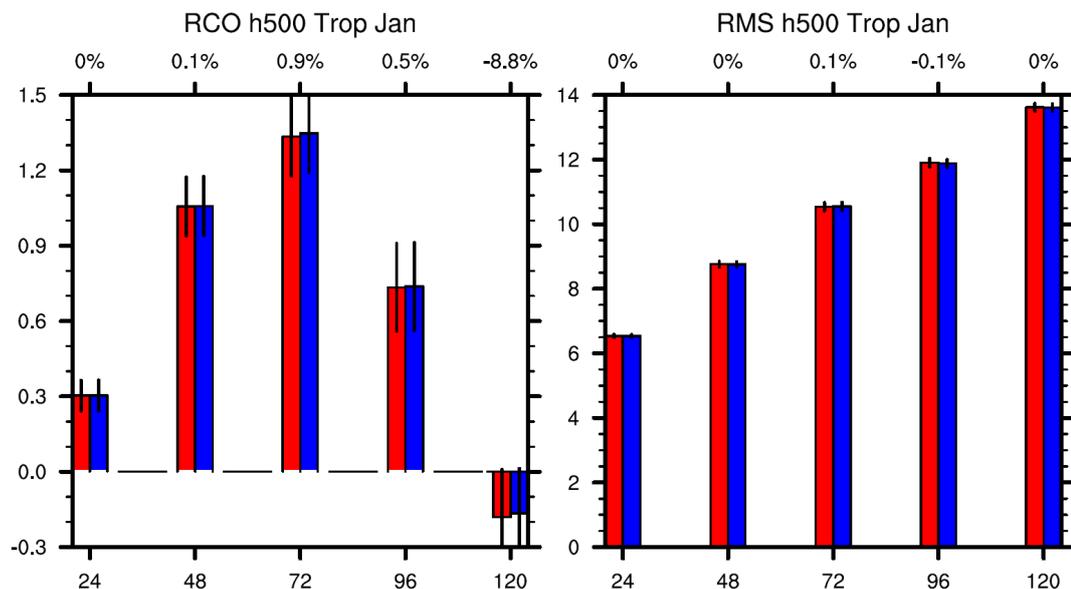


Рисунок 3.9 – Среднеквадратическая ошибка (RMS) и средняя ошибка (RCO) высоты уровня поверхности 500 гПа в тропиках (20° ю.ш. - 20° с.ш.).

поля. Стоит отметить, что новая версия модели выполняет расчет на 1 год за 146 минут по сравнению со 167 минутами для версии с вычислениями с двойной точностью. Результаты этих экспериментов показали, что введение расчетов

одинарной точности в вышеуказанные части модели не оказывает существенного влияния на модельный климат.

3.3. Оптимизация работы с памятью

3.3.1. Управление длиной вектора в блоке физических параметризаций подсеточного масштаба

Блок вычисления правых частей прогностических уравнений, описывающих параметризованные процессы подсеточных масштабов, занимает большую часть вычислительного времени модели ПЛАВ. Подробное описание особенностей реализации этого блока в модели ПЛАВ приведено в работе [28].

Вычисления в этом блоке обычно выполняются только в вертикальном измерении, что позволяет выполнять их независимо для разных вертикальных столбцов модели. Таким образом, оптимальное расположение индексов массивов для этого блока с точки зрения векторизации циклов и доступа к памяти – [горизонтальная размерность, вертикальная размерность] (При использовании системы индексации языка Fortran). В то же время, в связи с наличием зависимостей вычислений в вертикальном направлении, OpenMP распараллеливание циклов возможно только вдоль горизонтального направления. Однако использование OpenMP-распараллеливания по «быстрому» первому индексу массива Fortran, вероятно, будет неэффективным. Это связано, во-первых, с возможностью попадания в кэш-линию, считываемую одной нитью, области обрабатываемой другой OpenMP нитью. Одновременное обновление отдельных элементов в одной строке кэша разными процессорами переводит всю линию в состояние *invalid*, хотя эти обновления логически независимы друг от друга. Каждое обновление отдельного элемента строки кэша приводит к тому, что данная строка помечается как *invalid*. Другие процессоры, обращающиеся к другому элементу в этой же строке, вынуждены обращаться в память для получения новой копии кэш-линии, несмотря на то, что элемент, к которому осуществляется доступ, не был изменен. Это связано с тем, что когерентность кэша поддерживается на основе всей кэш-линии, а не отдельных её элементов. В ре-

зультате происходит увеличение накладных расходов. Кроме того, в то время как происходит обновление кэш-линии, доступ к элементам в этой строке запрещен. Такая ситуация называется ложным совместным использованием (*false sharing*). Если это происходит часто, производительность и масштабируемость по OpenMP значительно уменьшается. Во-вторых, при использовании такой схемы распараллеливания, данные, обрабатываемые каждой нитью, расположены в памяти непоследовательно и плохо локализованы. С увеличением количества нитей степень локализации ухудшается. Чтобы избежать этих эффектов в модели ПЛАВ перед вызовом процедуры расчета параметризаций происходит копирование всех необходимых данных в локальные временные массивы. Эта модификация приводит к дополнительным накладным расходам, связанным с копированием данных, но позволяет комбинировать эффективную векторизацию операций в циклах и OpenMP распараллеливание. В рамках такого подхода для каждой OpenMP нити инициализируется набор временных массивов размера $(\frac{NLON}{N_{omp}}, NLEV)$, где $NLON$ – размерность расчетной сетки вдоль долготы, N_{omp} – количество используемых OpenMP нитей, $NLEV$ – количество вертикальных уровней модели. Необходимые для вычислений данные копируются в эти локальные массивы. Схематичное изображение распределения вычислительной нагрузки в OpenMP нитях приведено на Рисунке 3.10.

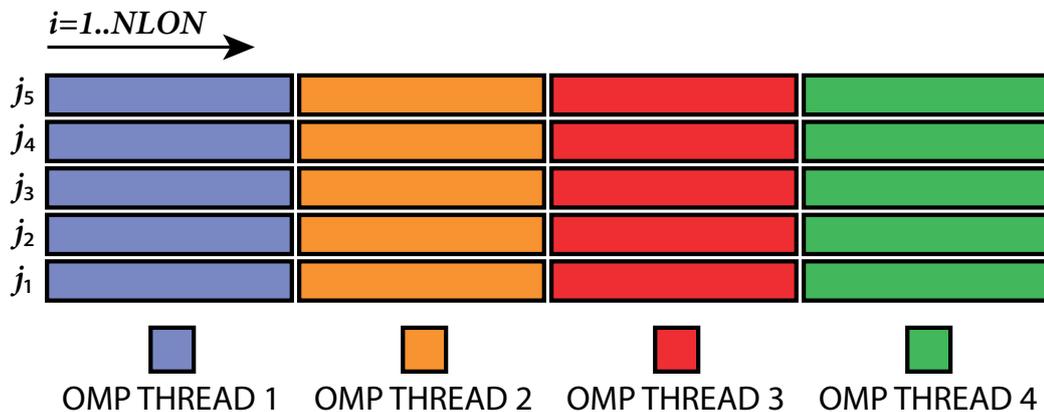


Рисунок 3.10 – Схематичное изображение распределения вычислительной нагрузки по OpenMP нитям в блоке параметризаций модели ПЛАВ. Все расчеты в блоке параметризаций производятся последовательно для каждой подобласти.

Тот факт, что мы уже используем локальные временные массивы для каждой OpenMP нити, позволяет выбирать размер этих массивов вдоль первого

измерения произвольным образом. Таким образом, можно надеяться оптимизировать скорость вычислений в этом блоке за счет уменьшения размера подобласти, для которой выполняются вычисления. Идея этого подхода заключается в том, чтобы уменьшить размер массивов, участвующих в вычислениях, тем самым увеличить степень локализации данных, уменьшить количество промахов кэша и повысить эффективность использования памяти процессоров. Таким образом вместо разделения вычислительной области в зависимости от количества OpenMP потоков производится декомпозиция всей вычислительной области на блоки размером $\frac{NLON}{NB} \times NLEV$ и перераспределение этих блоков по OpenMP нитям. При этом на каждый MPI-процесс приходится $NB \times NJ$ блоков, где NJ – количество узлов сетки вдоль широты, соответствующих данному MPI-процессу. Схематическое изображение этого подхода показано на Рисунке 3.11. Применение такого подхода позволяет выбирать оптимальный размер расчетных блоков независимо от количества потоков OpenMP и горизонтального разрешения используемой расчетной сетки.

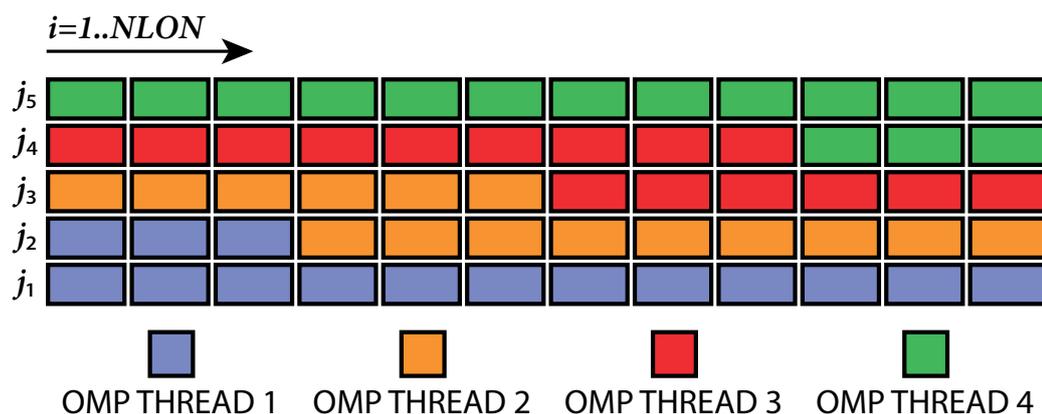


Рисунок 3.11 – Схематичное изображение нового подхода для распределения вычислительной нагрузки по OpenMP нитям в блоке параметризаций модели ПЛАВ. Все расчеты в блоке параметризаций производятся последовательно для каждой подобласти.

Было исследовано влияние изменения количества блоков NB на время расчетов в блоке параметризации модели ПЛАВ с разрешением 10 км с использованием 108 вычислительных узлов и 6 OMP-потоков на системе Cray XC40. Рисунок 3.12 иллюстрирует изменение процессорного времени, затрачиваемого в блоке параметризаций, в зависимости от количества блоков в каждом OpenMP потоке по сравнению с использованием одного блока. На рисунке 3.13 приведены эти же измерения для модели с разрешением 20 км при использовании 27

вычислительных узлов и 4 потоков OpenMP на каждом узле. На этих графиках приведены замеры для блока параметризаций без использования параметризации солнечного излучения (вызывается на каждом шаге по времени модели) и с ними (вызывается каждые полчаса модельного времени). Видно, что для обеих версий модели оптимальным является количество блоков $NB = 25$. При этом наблюдается заметное уменьшение времени вычислений.

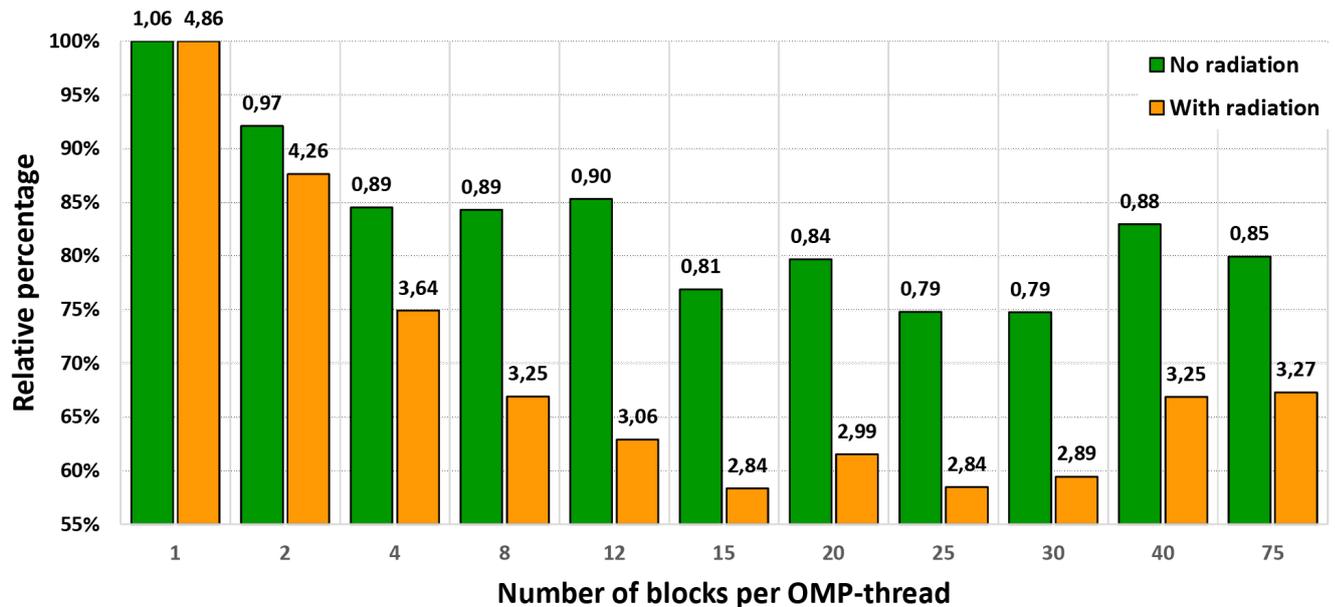


Рисунок 3.12 — Уменьшение времени, затрачиваемого вычисления в блоке параметризаций модели ПЛАВ с разрешением 10 км в зависимости от количества блоков NB . Цифры над столбцами показывают время в секундах.

3.3.2. Оптимизация хранения вектора-состояния модели

Исторически в модели ПЛАВ для хранения вектора состояния модели $\vec{\varphi} = (u, v, T, q, D, \xi, \ln p_s)^T$ используется один трехмерный массив RB3. В ранних версиях модели этот массив имел расположение индексов и размерности $(NLON, 6NLEV + 5, NJ)$, где $NLON$ – количество узлов сетки вдоль зонального направления, $NLEV$ – количество вертикальных уровней и NJ – количество узлов сетки вдоль широтного направления для данного MPI-процесса (величина второго измерения объясняется тем, что поверхностное давление является двумерной величиной, хранящейся вместе со своими производными).

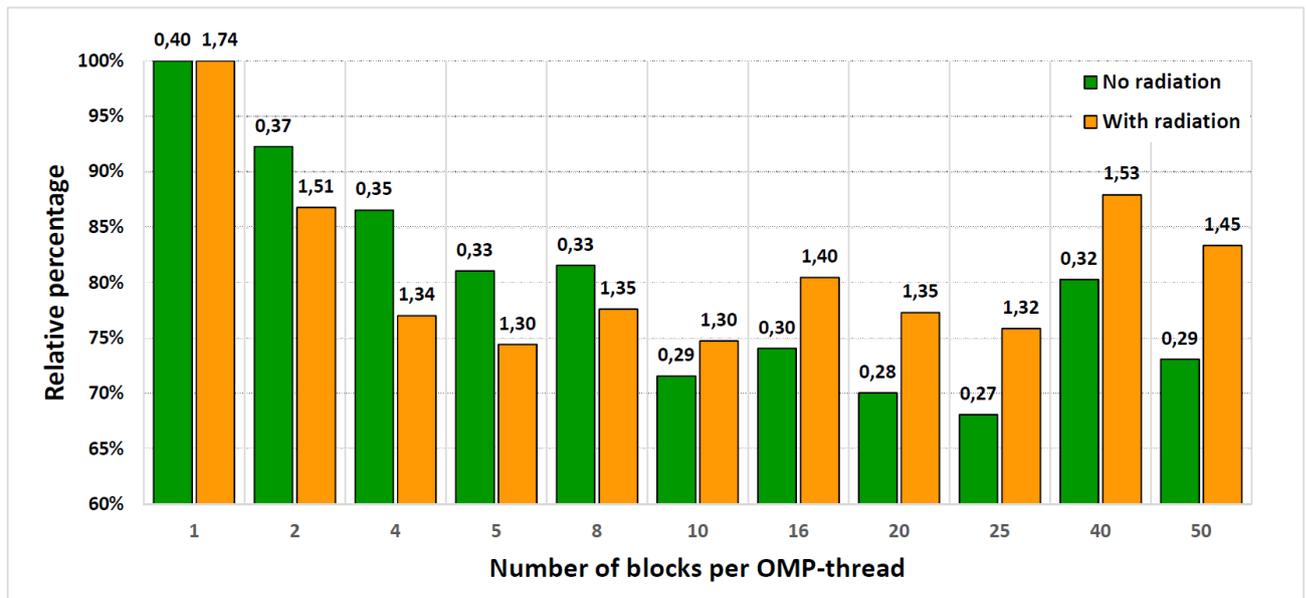


Рисунок 3.13 — Уменьшение времени, затрачиваемого вычисления в блоке параметризаций модели ПЛАВ с разрешением 20 км в зависимости от количества блоков NB . Цифры над столбцами показывают время в секундах.

Такая организация хранения данных была удобна с точки зрения распараллеливания вычислений (использовалось распараллеливание MPI и OpenMP в широтном направлении), поскольку позволяла производить MPI-обмены для всех полей вектора состояния одновременно без использования буферных массивов. Потребность в использовании большего количества процессорных ядер потребовала перехода на использование OpenMP распараллеливания циклов по другому измерению (долгота или волновые числа Фурье). С учетом большого объема исходного кода модели наиболее простым и эффективным способом организации такого перехода было изменение структуры массива вектора состояния на $(6NLEV + 5, NLON, NJ)$. Это позволило увеличить максимальное теоретически возможное количество используемых ядер с 865 до более чем 10000 для версии модели ПЛАВ с горизонтальным разрешением около 20 км [28]. Однако новое расположение индексов не является оптимальным с точки зрения доступа к памяти, так как ухудшает локализацию данных в памяти, особенно в модели ПЛАВ с разрешением по горизонтали около 10 км. Действительно, раньше $NLON \cdot NLEV$ значений сеточной функции лежали в памяти последовательно, а теперь только $NLEV$ значений. Это приводило к замедлению времени выполнения отдельных частей кода модели, что на тот момент было не очень значительным и являлось приемлемой платой за повышение

масштабируемости программного комплекса. Однако дальнейшие работы по оптимизации кода модели ПЛАВ, позволили значительно ускорить блоки подсчетных параметризаций и полулагранжевой адвекции, являющиеся наиболее трудоемкими частями модели. Повторное профилирование модели показало, что замедление, связанное с использованием неоптимальной структуры хранения вектора состояния, уже нельзя считать незначительным. Таким образом, упомянутый выше массив, используемый для хранения вектора состояния, был заменен отдельными массивами, имеющими размеры $(NLEV, NLON, NJ)$.

Эффект от внедрения этих изменений был протестирован на 70 км и 10 км версии модели ПЛАВ. Расчеты проводились на системе CrayXC40. Для версии модели с разрешением 70 км наблюдается ускорение выполнения шага по времени (без учета процедур ввода-вывода) на 16 – 22%, в зависимости от используемой конфигурации MPI-OpenMP. В частности, время, необходимое для расчета одного долгосрочного прогноза (фактически, один участник ансамбля) сократилась со 111 до 89 минут. Эффект этих оптимизаций еще более значителен для варианта модели ПЛАВ с горизонтальным разрешением 10 км. Эксперименты с использованием 2916 процессорных ядер (81 узел с 6 MPI-процессами и 6 потоками OpenMP) показывают снижение времени выполнения шага по времени без на 30%, что приводит к сокращению на 7 минут времени, необходимого для расчета оперативного прогноза погоды на 24 часа.

3.4. Основные результаты главы

Современная глобальная модель атмосферы должна эффективно работать на массивно-параллельных вычислительных системах с десятками тысяч процессорных ядер. В данной главе описаны работы по комплексной оптимизации параллельной структуры и алгоритмов программного комплекса модели ПЛАВ. Показано, что описанные модификации позволяют заметно увеличить параллельную и вычислительную эффективность кода для всех конфигураций модели, без существенного влияния на качество воспроизведения динамики атмосферы. На данный момент версия модели с горизонтальным разрешением 10 км показывает параллельную эффективность выше 50% при использовании 13608 ядер и позволяет задействовать для вычислений вплоть до 27216 ядер. При этом опе-

ративный среднесрочный прогноз погоды на 24 часа может быть вычислен за 13 минут при использовании всего 2916 процессорных ядер. Также важен тот факт, что долгосрочный прогноз (один член ансамбля) для версии ПЛАВ с разрешением 70 км теперь занимает всего 89 мин вместо 111 мин.

Заключение

Основные результаты работы состоят в следующем.

1. Предложен подход для построения горизонтальных дискретизаций на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере с разнесением переменных.
2. Исследована консервативность предложенных дискретизаций для линеаризованных уравнений мелкой воды на сфере. Получены необходимые и достаточные условия наличия закона сохранения массы и энергии, выражающиеся в виде ограничений на процедуры интерполяции вдоль долготы. Предложено семейство интерполяционных процедур удовлетворяющих этим ограничениям.
3. На основе предложенного подхода реализована полунявная полулагранжева модель мелкой воды на сфере. Проведены испытания этой модели на тестовых задачах, результаты которых свидетельствуют о перспективности данного подхода для применения в глобальных моделях динамики атмосферы.
4. Предложен геометрический многосеточный алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений на редуцированной сетке. Алгоритм обладает высокой скоростью сходимости и позволяет эффективно использовать как минимум 4608 процессорных ядер для сетки с разрешением 20 км.
5. Проведена комплексная оптимизация параллельной структуры и уточнение алгоритмов программного комплекса модели атмосферы ПЛАВ. Показано, что описанные модификации позволяют заметно сократить время расчетов и повысить параллельную масштабируемость кода модели.

Список литературы

1. *World Meteorological Organization*. Atlas of Mortality and Economic Losses from Weather, Climate and Water Extremes (1970–2019) / World Meteorological Organization. — World Meteorological Organization, 2021.
2. Второй оценочный доклад Росгидромета об изменениях климата и их последствиях на территории Российской Федерации / Г. В. Алексеев [и др.]. — Росгидромет, 2014.
3. *World Meteorological Organization*. Overview of Plans at NWP Centres with Global Forecasting Systems — 2018 / World Meteorological Organization. — World Meteorological Organization, 2018.
4. Vorticity-divergence semi-Lagrangian global atmospheric model SL-AV20: dynamical core / M. Tolstykh [и др.] // *Geoscientific Model Development*. — 2017. — Т. 10, № 5. — С. 1961–1983.
5. *Bauer, P.* The quiet revolution of numerical weather prediction / P. Bauer, A. Thorpe, G. Brunet // *Nature*. — 2015. — Т. 525, № 7567. — С. 47–55.
6. *Staniforth, A.* Horizontal grids for global weather and climate prediction models: a review / A. Staniforth, J. Thuburn // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2012. — Т. 138, № 662. — С. 1–26.
7. *Williamson, D.* The Evolution of Dynamical Cores for Global Atmospheric Models / D. Williamson // *J. Meteor. Soc. Jap.* — 2007. — Vol. 85B. — P. 241–269.
8. *Sadourny, R.* Conservative finite-difference approximations of the primitive equations on quasi-uniform spherical grids / R. Sadourny // *Monthly Weather Review*. — 1972. — Т. 100, № 2. — С. 136–144.
9. *Staniforth, A.* Gungho! a new dynamical core for the unified model / A. Staniforth, T. Melvin, N. Wood // *Proceeding of the ECMWF workshop on recent developments in numerical methods for atmosphere and ocean modelling*. — 2013. — С. 15–29.

10. A mixed finite-element, finite-volume, semi-implicit discretization for atmospheric dynamics: Cartesian geometry / T. Melvin [и др.] // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. — 2019. — Т. 145, № 724. — С. 2835–2853.
11. The nonhydrostatic solver of the GFDL finite-volume cubed-sphere dynamical core / L. Harris [и др.]. — 2020.
12. The ICON (ICOsahedral Non-hydrostatic) modelling framework of DWD and MPI-M: Description of the non-hydrostatic dynamical core / G. Zängl [и др.] // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. — 2015. — Т. 141, № 687. — С. 563–579.
13. *Kageyama, A.* “Yin-Yang grid”: An overset grid in spherical geometry / A. Kageyama, T. Sato // *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. — 2004. — Т. 5, № 9.
14. *Qaddouri, A.* The Canadian global environmental multiscale model on the Yin-Yang grid system / A. Qaddouri, V. Lee // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. — 2011. — Т. 137, № 660. — С. 1913–1926.
15. *Kurihara, Y.* Numerical integration of the primitive equations on a spherical grid / Y. Kurihara // *Mon. Weather Rev.* — 1965. — Т. 93. — С. 399–415.
16. *Duffell, P. C.* DISCO: a 3D moving-mesh magnetohydrodynamics code designed for the study of astrophysical disks / P. C. Duffell // *The Astrophysical Journal Supplement Series*. — 2016. — Т. 226, № 1. — С. 2.
17. *Thuburn, J.* A mimetic, semi-implicit, forward-in-time, finite volume shallow water model: comparison of hexagonal–icosahedral and cubed-sphere grids / J. Thuburn, C. Cotter, T. Dubos // *Geoscientific Model Development*. — 2014. — Т. 7, № 3. — С. 909–929.
18. *Taylor, M. A.* A compatible and conservative spectral element method on unstructured grids / M. A. Taylor, A. Fournier // *Journal of Computational Physics*. — 2010. — Т. 229, № 17. — С. 5879–5895.
19. *Nair, R. D.* Emerging numerical methods for atmospheric modeling / R. D. Nair, M. N. Levy, P. H. Lauritzen // *Numerical Techniques for Global Atmospheric Models*. — Springer, 2011. — С. 251–311.

20. *Randall, D. A.* Geostrophic adjustment and the finite-difference shallow-water equations / D. A. Randall // *Monthly Weather Review*. — 1994. — Т. 122, № 6. — С. 1371–1377.
21. *Staniforth, A.* Semi-Lagrangian integration schemes for atmospheric models—A review / A. Staniforth, J. Côté // *Monthly weather review*. — 1991. — Т. 119, № 9. — С. 2206–2223.
22. An inherently mass-conserving semi-implicit semi-Lagrangian discretisation of the shallow-water equations on the sphere / M. Zerroukat [и др.] // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*. — 2009. — Т. 135, № 642. — С. 1104–1116.
23. *Shashkin, V. V.* Parallel implementation of the cascade mass-conserving semi-Lagrangian transport scheme / V. V. Shashkin, M. A. Tolstykh // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2016. — Т. 31, № 1. — С. 17–28.
24. *Робер, А.* Полуявный метод / А. Робер // *Численные методы, используемые в атмосферных моделях. Т. 2 / под ред. В. Садоков*. — Л.: Гидрометеиздат, 1982. — С. 302–315.
25. *Müller, E. H.* Massively parallel solvers for elliptic partial differential equations in numerical weather and climate prediction / E. H. Müller, R. Scheichl // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2014. — Т. 140, № 685. — С. 2608–2624.
26. *Goyman, G. S.* Horizontal approximation schemes for the staggered reduced latitude-longitude grid / G. S. Goyman, V. V. Shashkin // *Journal of Computational Physics*. — 2021. — Т. 434. — С. 110234.
27. Improving the Computational Efficiency of the Global SL-AV Numerical Weather Prediction Model / M. A. Tolstykh [и др.] // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2021. — Т. 8, № 4. — С. 11–23.
28. Structure and algorithms of SL-AV atmosphere model parallel program complex / M. Tolstykh [и др.] // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — 2018. — Т. 39, № 4. — С. 587–595.

29. Further development of the parallel program complex of SL-AV atmosphere model / M. Tolstykh [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2017. — С. 290–298.
30. SL-AV model: numerical weather prediction at extra-massively parallel supercomputer / M. Tolstykh [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2018. — С. 379–387.
31. Supercomputing the seasonal weather prediction / R. Fadeev [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2019. — С. 415–426.
32. Implementation of SL-AV Global Atmosphere Model with 10 km Horizontal Resolution / M. Tolstykh [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2020. — С. 216–225.
33. Development of the global multiscale atmosphere model: computational aspects / M. Tolstykh [и др.] // Journal of Physics: Conference Series. T. 1740. — IOP Publishing. 2021. — С. 012074.
34. Система моделирования атмосферы для бесшовного прогноза / М. Толстых [и др.]. — М.: Триада лтд, 2017.
35. *Arakawa, A.* A potential enstrophy and energy conserving scheme for the shallow water equations / A. Arakawa, V. R. Lamb // Monthly Weather Review. — 1981. — Т. 109, № 1. — С. 18–36.
36. FVM 1.0: a nonhydrostatic finite-volume dynamical core for the IFS / C. Kühnlein [и др.] // Geoscientific model development. — 2019. — Т. 12. — С. 651–676.
37. *Pudykiewicz, J. A.* On numerical solution of the shallow water equations with chemical reactions on icosahedral geodesic grid / J. A. Pudykiewicz // Journal of Computational Physics. — 2011. — Т. 230, № 5. — С. 1956–1991.
38. *Bao, L.* A mass and momentum flux-form high-order discontinuous Galerkin shallow water model on the cubed-sphere / L. Bao, R. D. Nair, H. M. Tufo // Journal of Computational Physics. — 2014. — Т. 271. — С. 224–243.
39. *Ullrich, P. A.* High-order finite-volume methods for the shallow-water equations on the sphere / P. A. Ullrich, C. Jablonowski, B. Van Leer // Journal of Computational Physics. — 2010. — Т. 229, № 17. — С. 6104–6134.

40. A brief overview of the FV3 dynamical core / S. Lin [и др.] // Princeton, New Jersey, USA: NOAA Geophysical Fluid Dynamics Laboratory, The GFDL FV3 NGGPS Development Team. — 2016.
41. *Bénard, P.* Circumventing the pole problem of reduced lat–lon grids with local schemes. Part I: Analysis and model formulation / P. Bénard, M. Glinton // *Q. J. Roy. Meteor. Soc.* — 2019. — T. 145, № 721. — С. 1377–1391.
42. *Li, J.-G.* Shallow-water equations on a spherical multiple-cell grid / J.-G. Li // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society.* — 2018. — T. 144, № 710. — С. 1–12.
43. A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry / D. L. Williamson [и др.] // *Journal of Computational Physics.* — 1992. — T. 102, № 1. — С. 211–224.
44. *Galewsky, J.* An initial-value problem for testing numerical models of the global shallow-water equations / J. Galewsky, R. K. Scott, L. M. Polvani // *Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography.* — 2004. — T. 56, № 5. — С. 429–440.
45. *Staniforth, A.* Some exact solutions of geophysical fluid-dynamics equations for testing models in spherical and plane geometry / A. Staniforth, A. White // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography.* — 2007. — T. 133, № 627. — С. 1605–1614.
46. *Läuter, M.* Unsteady analytical solutions of the spherical shallow water equations / M. Läuter, D. Handorf, K. Dethloff // *Journal of computational physics.* — 2005. — T. 210, № 2. — С. 535–553.
47. A unified approach to energy conservation and potential vorticity dynamics for arbitrarily-structured C-grids / T. D. Ringler [и др.] // *Journal of Computational Physics.* — 2010. — T. 229, № 9. — С. 3065–3090.
48. On some spurious mode issues in shallow-water models using a linear algebra approach / D. Le Roux [и др.] // *Ocean Modelling.* — 2005. — T. 10, № 1/2. — С. 83–94.
49. *Thuburn, J.* Rossby wave propagation on the C-grid / J. Thuburn // *Atmos. Sci. Lett.* — 2007. — T. 8. — С. 37–42.

50. *Thuburn, J.* Conservation and linear Rossby-mode dispersion on the spherical C-grid / J. Thuburn, A. Staniforth // *Mon. Weather Rev.* — 2004. — T. 132. — C. 641–653.
51. *Peixoto, P. S.* Numerical instabilities of spherical shallow-water models considering small equivalent depths / P. S. Peixoto, J. Thuburn, M. J. Bell // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society.* — 2018. — T. 144, № 710. — C. 156–171.
52. Quadrature rules for periodic integrands. Bi-orthogonality and para-orthogonality / R. Cruz-Barroso [и др.] // *Annales Mathematicae et Informaticae.* T. 32. — Eszterházy Károly College, Institute of Mathematics, Computer Science. 2005. — C. 5–44.
53. *Fadeev, R.* Algorithm for Reduced Grid Generation on a Sphere for a Global Finite-Difference Atmospheric Model / R. Fadeev // *Comp. Math. Math. Phys.* — 2013. — T. 53. — C. 237–252.
54. *Tolstykh, M.* Vorticity–divergence mass-conserving semi-Lagrangian shallow-water model using the reduced grid on the sphere / M. Tolstykh, V. Shashkin // *Journal of Comp. Phys.* — 2012. — T. 231, № 11. — C. 4205–4233.
55. *Leopardi, P.* A partition of the unit sphere into regions of equal area and small diameter / P. Leopardi // *Electronic Transactions on Numerical Analysis.* — 2006. — T. 25, № 12. — C. 309–327.
56. *Beckers, B.* A general rule for disk and hemisphere partition into equal-area cells / B. Beckers, P. Beckers // *Computational Geometry.* — 2012. — T. 45, № 7. — C. 275–283.
57. *Fjørtoft, R.* On the changes in the spectral distribution of kinetic energy for twodimensional, nondivergent flow / R. Fjørtoft // *Tellus.* — 1953. — T. 5, № 3. — C. 225–230.
58. *Van der Vorst, H. A.* Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems / H. A. Van der Vorst // *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing.* — 1992. — T. 13, № 2. — C. 631–644.
59. *Shuman, F. G.* On certain truncation errors associated with spherical coordinates / F. G. Shuman // *Journal of Applied Meteorology.* — 1970. — T. 9, № 4. — C. 564–570.

60. *Hortal, M.* The development and testing of a new two-time-level semi-Lagrangian scheme (SETTLS) in the ECMWF forecast model / M. Hortal // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography. — 2002. — Т. 128, № 583. — С. 1671–1687.
61. *Thuburn, J.* Some basic dynamics relevant to the design of atmospheric model dynamical cores / J. Thuburn // Numerical Techniques for Global Atmospheric Models. — Springer, 2011. — С. 3–27.
62. *Марчук, Г.* Методы расщепления / Г. Марчук. — М.: Наука, 1988. — 263 с.
63. *Temperton, C.* A two-time-level semi-Lagrangian spectral global model / C. Temperton, M. Hortal, A. Simmons // Quart. J.Roy. Met.Soc. — 2001. — Vol. 127. — P. 111–129.
64. An inherently mass-conserving semi-implicit semi-Lagrangian discretization of the deep-atmosphere global non-hydrostatic equations / N. Wood [и др.] // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. — 2014. — Т. 140, № 682. — С. 1505–1520.
65. *Maynard, C.* Multigrid preconditioners for the mixed finite element dynamical core of the LFRic atmospheric model / C. Maynard, T. Melvin, E. H. Müller // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. — 2020. — Т. 146, № 733. — С. 3917–3936.
66. *Buckeridge, S.* Parallel geometric multigrid for global weather prediction / S. Buckeridge, R. Scheichl // Numerical Linear Algebra with Applications. — 2010. — Т. 17, № 2/3. — С. 325–342.
67. Atlas : A library for numerical weather prediction and climate modelling / W. Deconinck [и др.] // Computer Physics Communications. — 2017. — Т. 220. — С. 188–204. — URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517302138>.
68. *Федоренко, Р. П.* Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений / Р. П. Федоренко // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1961. — Т. 1, № 5. — С. 922–927.
69. *Trottenberg, U.* Multigrid / U. Trottenberg, C. W. Oosterlee, A. Schuller. — Elsevier, 2000.

70. *Hackbusch, W.* Multi-grid methods and applications. T. 4 / W. Hackbusch. — Springer Science & Business Media, 2013.
71. *Briggs, W. L.* A multigrid tutorial / W. L. Briggs, V. E. Henson, S. F. McCormick. — SIAM, 2000.
72. *Falgout, R. D.* hypre: A library of high performance preconditioners / R. D. Falgout, U. M. Yang // International Conference on Computational Science. — Springer. 2002. — С. 632–641.
73. Scaling hypre’s multigrid solvers to 100,000 cores / A. H. Baker [и др.] // High-Performance Scientific Computing. — Springer, 2012. — С. 261–279.
74. *Blatt, M.* The iterative solver template library / M. Blatt, P. Bastian // International Workshop on Applied Parallel Computing. — Springer. 2006. — С. 666–675.
75. *Ippisch, O.* Scalability test of $\mu\phi$ and the parallel algebraic multigrid solver of DUNE-ISTL / O. Ippisch, M. Blatt // Jülich Blue Gene/P Extreme Scaling Workshop, no. FZJ-JSC-IB-2011-02. Jülich Supercomputing Centre. — 2011.
76. A semi-implicit version of the MPAS-atmosphere dynamical core / S. Sandbach [и др.] // Monthly Weather Review. — 2015. — Т. 143, № 9. — С. 3838–3855.
77. *Larsson, J.* Conditional semicoarsening multigrid algorithm for the Poisson equation on anisotropic grids / J. Larsson, F. Lien, E. Yee // Journal of Computational Physics. — 2005. — Т. 208, № 1. — С. 368–383.
78. *Börm, S.* Analysis of tensor product multigrid / S. Börm, R. Hiptmair // Numerical Algorithms. — 2001. — Т. 26, № 3. — С. 219–234.
79. LFRic: Meeting the challenges of scalability and performance portability in Weather and Climate models / S. V. Adams [и др.] // Journal of Parallel and Distributed Computing. — 2019. — Т. 132. — С. 383–396.
80. *Mozdzyński, G.* A new partitioning approach for ECMWF’s integrated forecasting system (IFS) / G. Mozdzyński // Use Of High Performance Computing In Meteorology. — World Scientific, 2007. — С. 148–166.
81. *Leopardi, P.* A partition of the unit sphere into regions of equal area and small diameter / P. Leopardi // Electronic Transactions on Numerical Analysis. — 2006. — Т. 25, № 12. — С. 309–327.

82. *Pınar, A.* Fast optimal load balancing algorithms for 1D partitioning / A. Pınar, C. Aykanat // *Journal of Parallel and Distributed Computing*. — 2004. — Т. 64, № 8. — С. 974–996.
83. Multiscale global atmosphere model SL-AV: the results of medium-range weather forecasts / M. Tolstykh [и др.] // *Russian Meteorology and Hydrology*. — 2018. — Т. 43, № 11. — С. 773–779.
84. The ALADIN System and its canonical model configurations AROME CY41T1 and ALARO CY40T1 / P. Termonia [и др.] // *Geoscientific Model Development*. — 2018. — Т. 11, № 1. — С. 257–281.
85. *Chou, M.* A solar radiation parameterization (CLIRAD–SW) for atmospheric studies—1999 / M. Chou, M. Suarez // *NASA Tech. Memo.* — — Т. 10460.
86. *Tarasova, T.* The use of new parameterizations for gaseous absorption in the CLIRAD-SW solar radiation code for models / T. Tarasova, B. Fomin // *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*. — 2007. — Т. 24, № 6. — С. 1157–1162.
87. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave / E. J. Mlawer [и др.] // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1997. — Т. 102, № D14. — С. 16663–16682.
88. Coupled atmosphere–ocean model SLAV–INMIO: implementation and first results / R. Y. Fadeev [и др.] // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2016. — Т. 31, № 6. — С. 329–337.
89. *Fadeev, R. Y.* Climate Version of the SL-AV Global Atmospheric Model: Development and Preliminary Results. / R. Y. Fadeev, M. Tolstykh, E. Volodin // *Russian Meteorology & Hydrology*. — 2019. — Т. 44, № 1.
90. *Thornes, T.* On the use of scale-dependent precision in Earth system modelling / T. Thornes, P. Düben, T. Palmer // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2017. — Т. 143, № 703. — С. 897–908.
91. *Palmer, T. N.* More reliable forecasts with less precise computations: a fast-track route to cloud-resolved weather and climate simulators? / T. N. Palmer // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 2014. — Т. 372, № 2018. — С. 20130391.

92. *Baede, A.* The effect of arithmetic precision on some meteorological integrations / A. Baede, D. Dent, A. Hollingsworth. — European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, 1976.
93. Single precision in weather forecasting models: An evaluation with the IFS / F. Váňa [и др.] // *Monthly Weather Review*. — 2017. — Т. 145, № 2. — С. 495—502.
94. More accuracy with less precision / S. T. Lang [и др.] // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2021. — Т. 147, № 741. — С. 4358—4370.
95. Single precision in the dynamical core of a nonhydrostatic global atmospheric model: Evaluation using a baroclinic wave test case / M. Nakano [и др.] // *Monthly Weather Review*. — 2018. — Т. 146, № 2. — С. 409—416.
96. On the use of programmable hardware and reduced numerical precision in earth-system modeling / P. D. Düben [и др.] // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. — 2015. — Т. 7, № 3. — С. 1393—1408.
97. *World Meteorological Organization.* Manual on the Global Data-processing and Forecasting System / World Meteorological Organization. — World Meteorological Organization, 2010.
98. *Holton, J. R.* An introduction to dynamic meteorology / J. R. Holton // *American Journal of Physics*. — 1973. — Т. 41, № 5. — С. 752—754.
99. *Simmons, A. J.* An energy and angular-momentum conserving vertical finite-difference scheme and hybrid vertical coordinates / A. J. Simmons, D. M. Burridge // *Monthly Weather Review*. — 1981. — Т. 109, № 4. — С. 758—766.
100. *Bates, J.* A global multilevel atmospheric model using a vector semi-Lagrangian finite-difference scheme. Part I: Adiabatic formulation / J. Bates, S. Moorthi, R. Higgins // *Mon. Wea. Rev.* — 1993. — Vol. 121. — P. 244—263.
101. *Rochas, M.* ARPEGE Documentation, Part 2, Chapter 6 / M. Rochas // Available from Météo-France. — 1990.
102. *Temperton, C.* Treatment of the Coriolis terms in semi-Lagrangian spectral models / C. Temperton // *Atmos.- Ocean*. — 1997. — Vol. 35:sup1. — P. 293—302.

103. *Randall, D.* Geostrophic adjustment and the finite-difference shallow water equations / D. Randall // *Mon. Wea. Rev.* — 1994. — Т. 122. — С. 1371–1377.
104. *McDonald, A.* A two time-level, three-dimensional, semi-Lagrangian, semi-implicit, limited-area gridpoint model of the primitive equations. Part II: Extension to hybrid vertical coordinates / A. McDonald, J. E. Haugen // *Monthly weather review.* — 1993. — Т. 121, № 7. — С. 2077–2087.
105. *Ritchie, H.* A comparison of spatially averaged Eulerian and semi-Lagrangian treatments of mountains / H. Ritchie, M. Tanguay // *Monthly Weather Review.* — 1996. — Т. 124, № 1. — С. 167–181.
106. *Robert, A.* A semi-Lagrangian and semi-implicit numerical integration scheme for multilevel atmospheric models / A. Robert, T. Yee, H. Ritchie // *Mon. Wea. Rev.* — 1985. — Vol. 113. — P. 388–394.
107. *Марчук, Г.* Численные методы в прогнозе погоды / Г. Марчук. — Л.: Гидрометеиздат, 1967. — 353 с.
108. *Tolstykh, M.* Variable resolution global semi-Lagrangian atmospheric model / M. Tolstykh // *Russ. J. Num. An. Math. Mod.* — 2003. — Vol. 18. — P. 347–361.
109. *Lele, S.* Compact finite difference schemes with spectral-like resolution / S. Lele // *J. Comput. Phys.* — 1992. — Vol. 103. — P. 16–42.
110. *Tolstykh, M.* Vorticity-divergence mass-conserving semi-Lagrangian shallow-water model using the reduced grid on the sphere / M. Tolstykh, V. Shashkin // *J. Comput. Phys.* — 2012. — Vol. 231. — P. 4205–4233.

Приложение А

Описание блока решения уравнений динамики модели ПЛАВ

А.1. Уравнения гидротермодинамики атмосферы

Уравнения модели выведены из системы «примитивных» уравнений [98] (уравнения гидротермодинамики атмосферы в приближениях гидростатики, мелкой атмосферы и сферической Земли). По вертикали используется гибридная координата [99]. Давление на уровне η гибридной системы координат задается формулой $p(\eta) = A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s$, где p_s - приземное давление, а p_0 - константа, примерно равная среднему давлению на уровне Земли. Уровни гибридной системы координат огибают рельеф около поверхности Земли ($A = 0$), затем с ростом высоты приближаются к изобарическим поверхностям и совпадают с ними выше некоторого уровня ($B = 0$).

В приведенных ниже уравнениях используются следующие обозначения:

1. (λ, φ) – долгота и широта на сфере;
2. \vec{r} – радиус вектор точки на сфере;
3. a - радиус Земли;
4. \vec{V} – горизонтальная скорость ветра
5. u и v – компоненты \vec{V} ;
6. $D = \nabla \cdot \vec{V}$ – горизонтальная дивергенция;
7. $\zeta = \vec{k} \cdot \nabla \times \vec{V}$ – вертикальная компонента относительной завихренности;
8. $\vec{k} = \vec{r}/a$ – единичный вектор сферической системы координат по вертикали;
9. $\dot{\eta}$ – вертикальная скорость в гибридной системе координат;
10. $f = 2|\vec{\Omega}| \sin \varphi$ – параметр Кориолиса
11. $\vec{\Omega}$ – угловая скорость вращения Земли;
12. Φ – геопотенциал (высота уровня η умноженная на ускорение свободного падения g);
13. T – температура;
14. Φ_s – геопотенциал поверхности Земли;

15. ∇ – оператор Набла;
16. $\frac{d}{dt}$ – Лагранжева производная по времени (производная вдоль траектории частицы, движущейся вместе с жидкостью);
17. F_ψ – источник/сток произвольной величины ψ вследствие процессов подсеточного масштаба;
18. c_{pd} – теплоемкость сухого воздуха при постоянном давлении;
19. c_p – теплоемкость влажного воздуха при постоянном давлении, учитывает вклады от всех агрегатных состояний воды.

Так же используется виртуальная температура

$$T_v = \frac{R_{\text{moist}}}{R_d} T, \quad (\text{A.1})$$

где R_d – газовая постоянная сухого воздуха,

$R_{\text{moist}} = (1 - q - \sum q_i) R_d + q R_v$ – газовая постоянная влажного воздуха,

q – удельная концентрация водяного пара,

q_i – удельная концентрация жидких и твердых фаз воды (град, снег, капли),

R_v – газовая постоянная водяного пара.

Введение виртуальной температуры позволяет записать уравнение состояния для смеси воздуха и различных фаз воды как для одного газа $p = \rho R_d T_v$, где ρ – плотность воздуха.

Уравнения для горизонтального ветра записываются в векторной форме [100], что позволяет не вычислять явным образом метрические слагаемые, пропорциональные $\text{tg } \varphi$ и, таким образом, избежать неустойчивости около полюсов:

$$\left(\frac{d\vec{V}}{dt} + 2\vec{\Omega} \times \frac{d\vec{r}}{dt} \right)_H = -\nabla\Phi - R_d T_v \frac{\nabla p}{p} + \vec{F}_{\vec{V}}, \quad (\text{A.2})$$

где индекс H обозначает проекцию на поверхность сферы.

Сила Кориолиса записана в адвективной форме (внутри d/dt) согласно [101] (см. также [102]). Выражение для давления $p(\eta) = A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s$ используется, что бы переписать слагаемое $\frac{\nabla p}{p}$ в форме $\frac{B(\eta)p_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s} \nabla \ln p_s$.

Прогностические переменные, описывающие поле горизонтального ветра в модели – вертикальный компонент относительной завихренности ζ и горизонтальная дивергенция D . Компоненты вектора \vec{V} играют вспомогательную роль.

Как показано в [103], при такой формулировке уравнений на неразнесенной по горизонтали сетке численная дисперсия инерционно-гравитационных волн аналогична случаю разнесенной сетки типа «С», численные характеристики распространения волн Россби при этом ближе к теоретическим, чем на сетке «С». Уравнение для ζ получается путем применения оператора $\vec{k} \cdot \nabla \times$ к уравнению горизонтального ветра (A.2):

$$\frac{d}{dt} (\zeta + f) = - (\zeta + f) D - J_\zeta + F_\zeta, \quad (\text{A.3})$$

$$J_\zeta = \frac{B(\eta)p_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s} \frac{R_d}{a^2 \cos \varphi} \left(\frac{\partial T_v}{\partial \lambda} \frac{\partial \ln p_s}{\partial \varphi} - \frac{\partial T_v}{\partial \varphi} \frac{\partial \ln p_s}{\partial \lambda} \right) + \quad (\text{A.4})$$

$$+ \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial \dot{\eta}}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \eta} - \cos \varphi \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial \varphi} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right). \quad (\text{A.5})$$

Уравнение для дивергенции D выводится из дискретизованного по времени уравнения (A.2) в разделе A.3

Термодинамическое уравнение для виртуальной температуры T_v можно получить, расписав $\frac{dT_v}{dt} = \frac{R_{\text{moist}}}{R_d} \frac{dT}{dt} + \frac{T}{R_d} \frac{dR_{\text{moist}}}{dt}$ и подставив вместо $\frac{dT}{dt}$ правую часть уравнения термодинамики из [98]:

$$\begin{aligned} \frac{d(T_v + \gamma(\eta)\Phi_s)}{dt} - \frac{R_{\text{moist}}T_v}{c_p} \left(\frac{p_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s} \dot{s} + \frac{B(\eta)p_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s} \frac{d_H \ln p_s}{dt} \right) = \\ = F_{T_v} + \gamma(\eta)\vec{V} \cdot \nabla \Phi_s + \dot{\eta} \frac{\partial \gamma(\eta)}{\partial \eta} \Phi_s, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$F_{T_v} = \frac{R_{\text{moist}}}{R_d} F_T + T \left[\left(\frac{R_v}{R_d} - 1 \right) F_q - \sum F_{q_i} \right], \quad (\text{A.7})$$

где $\frac{d_H}{dt}$ – производная вдоль траектории (лагранжева производная) без учета вертикального смещения.

Слагаемое, отвечающее за преобразование энергии $\frac{1}{p} \frac{dp}{dt}$, записано аналогично [104] с использованием $\ln p_s$ и аналога вертикальной скорости $\dot{s} = \frac{1}{p_s} \frac{\partial p}{\partial \eta} \dot{\eta}$. Слагаемое $\gamma(\eta)\Phi_s$ было предложено в [105] для подавления ложного орографического резонанса, кроме того оно сглаживает поле температуры в горных регионах и, таким образом, повышает точность расчета адвекции температуры. Использование T_v и \dot{s} уменьшает нелинейность системы уравнений, так

как именно эти величины входят в уравнения неразрывности и гидростатики, приведенные ниже.

Уравнение неразрывности записывается через $\ln p_s$ и \dot{s} аналогично уравнению (5) из [104]:

$$\frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{d_H}{dt} \left(\ln p_s + \frac{\Phi_s}{R_d T_{\text{const}}} \right) = - \frac{\frac{\partial A}{\partial \eta} p_0 + \frac{\partial B}{\partial \eta} p_s}{p_s} D - \frac{\partial \dot{s}}{\partial \eta} + \frac{\partial B}{\partial \eta} \vec{V} \cdot \nabla \left(\frac{\Phi_s}{R_d T_{\text{const}}} \right). \quad (\text{A.8})$$

Слагаемое $\left(\frac{\Phi_s}{R_d T_{\text{const}}} \right)$ было также предложено в [105] для подавления ложного орографического резонанса.

Уравнение гидростатики переписывается с помощью уравнения состояния идеального газа в виде:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = -R_d T_v \frac{\partial \ln p}{\partial \eta}. \quad (\text{A.9})$$

Уравнение переноса водяного пара и других фаз воды записываются в одинаковой форме:

$$\frac{dq}{dt} = F_q. \quad (\text{A.10})$$

Граничные условия для сформулированной выше системы уравнений (A.2)–(A.10) – непротекание $\dot{\eta} = 0$ на верхней $\eta = \eta_{top}$ и нижней $\eta = 1$ границах. Так же предполагается, что $B(\eta) = 1$, $A(\eta) = 0$ при $\eta = 1$, обычно $B(\eta) = 0$ выше некоторого уровня η_p , но модель может также работать и в частном случае σ -координат по вертикали $B(\eta) = \eta$, $A(\eta) = 0$.

A.2. Полулагранжева аппроксимация адвективных членов уравнений

Лагранжевы производные по времени в уравнениях пункта A.1 аппроксимируются по времени как $d\psi/dt = (\psi^{n+1} - \psi_*^n)/\Delta t$, где верхний индекс обозначает слой по времени $t^n = n\Delta t$, индекс * обозначает, что величина ψ вычисляется в исходной точке траектории лагранжевой частицы (в момент t^n), ψ без индекса * соответствует значению в конечной точке траектории (в момент t^{n+1}). Полулагранжев подход заключается в том, что на каждом шаге по времени каждая точка фиксированной вычислительной сетки является конечной точкой

траектории для некоторой лагранжевой частицы. Полулагранжева аппроксимация по времени устойчива при числах Куранта больше единицы, а значит шаг по времени Δt может быть выбран из соображений точности, а не устойчивости. Это значительно повышает вычислительную эффективность.

Начальная точка траектории лагранжевой частицы с конечной точкой в некотором узле сетки может быть приблизительно найдена путем интегрирования кинематического уравнения $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{V}$ на один шаг по времени назад. Интеграл от кинематического уравнения аппроксимируется по схеме SETTLS [60]:

$$\frac{\vec{r}^{n+1} - \vec{r}_*^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(\vec{V}^n + \vec{V}_*^{(n+1)e} \right), \quad (\text{A.11})$$

где $\vec{V}_*^{(n+1)e} = 2\vec{V}^n - \vec{V}^{n-1}$.

Уравнение (A.11) решается итеративным способом:

$$\vec{r}_{*m+1}^n = \vec{r}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \left(\vec{V}^n + \vec{V}_{*m}^{(n+1)e} \right), \quad (\text{A.12})$$

где индекс $*m$ обозначает начальную точку траектории на m -й итерации.

В итеративном процессе (A.12) используются дополнительные геометрические аппроксимации для учета сферической геометрии и приближения мелкой атмосферы [63].

Величины в начальных точках траекторий вычисляются с помощью интерполяции. Для вычисления адвективных слагаемых уравнений (слагаемых, возникших вследствие полулагранжевой дискретизации d/dt), используется трехмерная кубическая Эрмитова интерполяция. Для вычисления компонент горизонтального ветра \vec{V} и вертикальной скорости $\dot{\eta}$ в итеративном процессе (A.12), а также для неадвективных слагаемых уравнений используется трёхмерная линейная интерполяция. При интерполяции компонент векторных величин следует учесть изменение направления орт сферической координатной системы:

$$\frac{d\vec{\psi}}{dt} = \frac{1}{\Delta t} \left(\begin{pmatrix} \psi_\lambda \\ \psi_\varphi \end{pmatrix} - \mathfrak{R} \begin{pmatrix} \psi_{\lambda*} \\ \psi_{\varphi*} \end{pmatrix} \right), \quad (\text{A.13})$$

где \mathfrak{R} – матрица поворота [63].

А.3. Полуявная дискретизация по времени

Неадвективные члены прогностических уравнений (см. пункт А.1) интегрируются по времени с помощью комбинации схемы Кранк-Николсон с децентрированием псевдо-второго порядка [63] для линейных слагаемых и схемы SETTLS [60] для нелинейных слагаемых. В случае уравнения общего вида относительно произвольной величины ψ

$$\frac{d\psi}{dt} = L\psi + N(\psi), \quad (\text{A.14})$$

где L – линейный оператор, N – нелинейный оператор, дискретизация по времени записывается как:

$$\frac{\psi^{n+1} - \psi_*^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(N(\psi)_*^{(n+1)_e} + N(\psi)^n \right) + \frac{1 + \varepsilon}{2} L\psi^{n+1} + \frac{1 + \varepsilon}{2} L\psi_*^n \quad (\text{A.15})$$

$$- \frac{\varepsilon}{2} \left(L\psi_*^{(n+1)_e} + L\psi^n \right), \quad (\text{A.16})$$

$$(\cdot)^{(n+1)_e} = 2(\cdot)^n - (\cdot)^{n-1}.$$

Полуявная дискретизация по времени была разработана А. Робером [24; 106] на основе методов расщепления Г.И. Марчука [62; 107]. Использование полуявной дискретизации позволяет существенно увеличить шаг по времени, при котором расчеты будут устойчивы, так как наиболее быстрые волны (инерционно-гравитационные, звуковые и другие), которые, как правило, описываются линейными слагаемыми уравнений, интегрируются неявно. Применение явной схемы для нелинейных слагаемых, которые описывают медленные волны (например, волны Россби), позволяет обойти необходимость решения нелинейной системы уравнений, которая возникает при использовании полностью неявного метода.

Уравнение абсолютного вихря (А.3) дискретизируется следующим образом:

$$\zeta^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} f D^{n+1} = R_\zeta, \quad (\text{A.17})$$

где R_ζ – функция известных величин со слоя по времени n и экстраполированных величин $((n + 1)_e)$.

Для выделения линейных членов в уравнениях (А.2), (А.6), (А.8) используется постоянная фоновая температура \bar{T} и фоновый профиль давления

$\bar{p} = A(\eta)p_0 + B(\eta)\bar{p}_s$ (\bar{p}_s – константа). Сила градиента давления в уравнении для горизонтального ветра (A.2) разделяется на линейную и нелинейную части следующим образом:

$$\nabla \left(\Phi_s - \int_1^\eta R_d T_v d \ln p \right) + \frac{B(\eta)p_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s} R_d T_v \nabla \ln p_s = \underbrace{\left(\nabla G \right)}_{\text{линейная часть}} - \underbrace{\left(-\nabla \int_1^\eta R_d (T_v - \bar{T}) d \ln \frac{p}{\bar{p}} + \frac{B(\eta)p_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)p_s} R_d (T_v - \bar{T}) \nabla \ln p_s \right)}_{\text{нелинейная часть}} \quad (\text{A.18})$$

$$G = \Phi_s - \int_1^\eta R_d (T_v - \bar{T}) d \ln \bar{p} + R_d \bar{T} \ln p_s, \quad (\text{A.19})$$

Дискретное по времени уравнение горизонтального ветра (A.2) записывается как:

$$\vec{V}^{n+1} = -\frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \nabla G^{n+1} + \vec{R}_{\vec{V}}. \quad (\text{A.20})$$

Уравнение для горизонтальной дивергенции D получается путем применения операции $\nabla \cdot$ к дискретному по времени уравнению для горизонтального ветра (A.20):

$$D^{n+1} + \frac{(1 + \varepsilon)}{2} \Delta t \nabla^2 G^{n+1} = \nabla \cdot \vec{R}_{\vec{V}}. \quad (\text{A.21})$$

Дивергенция правой части дискретизованного по времени уравнения горизонтального ветра $\nabla \cdot \vec{R}_{\vec{V}}$ вычисляется с помощью дискретного оператора, приведенного в пункте A.5.1

В линейной части члена преобразования энергии уравнения термодинамики (A.6) используется полулагранжев подход для дискретизации лагранжевой производной $\ln p_s$, в нелинейной части эта производная заменяется на правую часть уравнения неразрывности (A.8). Итоговое уравнение, дискретизированное по времени, записывается следующим образом:

$$T_v^{n+1} - \frac{R_d \bar{T}}{c_{pd}} \frac{\bar{p}_s}{A(\eta)p_0 + B(\eta)\bar{p}_s} \left(B(\eta) \ln p_s^{n+1} + \frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \dot{s}^{n+1} \right) = R_T. \quad (\text{A.22})$$

Уравнение неразрывности (A.8) дискретизируется следующим образом:

$$\frac{\partial B}{\partial \eta} \ln p_s^{n+1} + \frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \frac{\frac{\partial A}{\partial \eta} p_0 + \frac{\partial B}{\partial \eta} \bar{p}_s}{\bar{p}_s} D^{n+1} + \frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \frac{\partial \dot{s}^{n+1}}{\partial \eta} = R_P. \quad (\text{A.23})$$

Интегрирование уравнения (A.23) от верхней границы модельной атмосферы до поверхности дает выражение для $\ln p_s^{n+1}$, независимое от \dot{s}^{n+1} , а интегрирование до уровня η приводит к выражению для \dot{s}^{n+1} :

$$\left(1 - B(\eta_{top})\right) \ln p_s^{n+1} = -\frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \int_{\eta=\eta_{top}}^{\eta=1} \left(\frac{(\partial A/\partial \eta)p_0 + (\partial B/\partial \eta)\bar{p}_s}{\bar{p}_s} D^{n+1} + R_P \right) d\eta, \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} \frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \dot{s}^{n+1}(\eta) = & -\left(B(\eta) - B(\eta_{top})\right) \ln p_s^{n+1} - \\ & -\frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \int_{\eta=\eta_{top}}^{\eta=\eta} \left(\frac{(\partial A/\partial \eta)p_0 + (\partial B/\partial \eta)\bar{p}_s}{\bar{p}_s} D^{n+1} + R_P \right) d\eta. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Правая часть уравнения (A.24) может быть подставлена вместо $\ln p_s^{n+1}$ в уравнение (A.25), что даст выражение для \dot{s}^{n+1} , зависящее только от одной неизвестной величины D^{n+1} .

Уравнения (A.17), (A.21), (A.22), (A.24), (A.25) и определение линейной части геопотенциала G (A.19) составляют линейную систему уравнений для переменных $(\zeta, D, T_v, \ln p_s, \dot{s}, G)$ на шаге по времени $n + 1$. Данная система решается способом, описанным ниже. Уравнения (A.24), (A.25) подставляются в уравнение (A.22), чтобы получить выражение для T_v^{n+1} , которое зависит только от D^{n+1} . Это выражение и уравнение (A.24) используются для исключения T_v^{n+1} и $\ln p_s^{n+1}$ из определения линейной части силы градиента давления G^{n+1} (A.19). Таким образом получается пара уравнений для неизвестных G^{n+1} и D^{n+1} , которая может быть записана как:

$$\vec{G} + \frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \mathbf{M} \vec{D} = \vec{H}, \quad (\text{A.26})$$

$$\vec{D} + \frac{1 + \varepsilon}{2} \Delta t \nabla^2 \vec{G} = \vec{R}_D, \quad (\text{A.27})$$

где \vec{G} , \vec{D} и \vec{R}_D – столбцы, состоящие из Nlev (количество модельных уровней по вертикали) компонент, с l -й компонентой, представляющей соответствующие горизонтальные поля на уровне l .

$$\vec{H} = \vec{\Phi}_s + R_d \mathbf{A} \vec{R}_T + \mathbf{M}' \vec{R}_P, \quad (\text{A.28})$$

где \mathbf{M} , \mathbf{M}' , \mathbf{A} – матрицы дискретных вертикальных операторов, получающихся в результате дискретизации по вертикали.

Подстановка \vec{D} из уравнения (A.27) в уравнение (A.26) и применение собственного разложения матрицы $M = P\Lambda P^{-1}$ приводит к Nlev двумерным задачам Гельмгольца относительно компонент столбца $P^{-1}\vec{G}$. Применяемые алгоритмы решения задачи Гельмгольца описаны в пункте A.5.4. После вычисления \vec{G} дивергенция \vec{D} может быть вычислена по формуле (A.26), далее дивергенция используется для нахождения $\ln p_s^{n+1}$, \dot{s}^{n+1} , T_v^{n+1} и ζ^{n+1} (см. уравнения (A.24), (A.25), (A.22), (A.17)). Вычисления величин $(n+1)$ -го шага по времени завершаются восстановлением горизонтального ветра \vec{V}^{n+1} по завихренности и дивергенции (способом, описанным в пункте A.5.3) и вычислением вертикальной скорости $\dot{\eta}$ (см. пункт A.4).

A.4. Дискретизация по вертикали

Используется разнесённая сетка Лоренца по вертикали, в которой все переменные, кроме вертикальной скорости $\dot{\eta}$ и ее аналога \dot{s} , расположены на «целых» уровнях η_l (центры ячеек). Вертикальная скорость $\dot{\eta}$ и ее аналог \dot{s} расположены на «полуцелых» уровнях $\eta_{l+1/2}$ (границы между ячейками).

Сетка по вертикали задаётся набором «полуцелых» уровней $\eta_{l+1/2}$ при $l \in [0, Nlev + 1]$, где Nlev – количество «целых» уровней. «Полуцелый уровень» $\eta_{1/2}$ – верхняя граница модельной атмосферы, $\eta_{Nlev+1/2} = 1$ соответствует поверхности Земли.

«Целые» уровни сетки задаются по формуле

$$\eta_l = \frac{(\eta_{l+1/2} + \eta_{l-1/2})}{2}, \quad l \in [1, Nlev]. \quad (A.29)$$

Шаг сетки на уровне l : $\Delta\eta_l = \eta_{l+1/2} - \eta_{l-1/2}$. Вертикальные производные аппроксимируются со вторым порядком точности:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)_l = \frac{\Delta\psi_l}{\Delta\eta_l} + O(\Delta\eta_l^2). \quad (A.30)$$

Уравнение гидростатики (A.9) интегрируется следующим образом:

$$\Phi_{Nlev} = \Phi_s + R_d T_{vNlev} \ln \frac{p_s}{p_{Nlev}}, \quad (A.31)$$

$$\Phi_{l-1} = \Phi_l + \frac{R_d}{2} (T_{vl} + T_{vl-1}) \ln \frac{p_l}{p_{l-1}}. \quad (A.32)$$

Интегралы по вертикали в дискретном по времени уравнении неразрывности (A.23), а также в уравнениях (A.24), (A.25) вычисляются по правилу средней точки. В начале каждого шага по времени вертикальная скорость перевычисляется с помощью диагностического выражения, выведенного из эйлеровой формы уравнения неразрывности (A.8):

$$\frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial p_s}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \vec{V} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \dot{\eta} \right). \quad (\text{A.33})$$

Интегрирование уравнения (A.33) от $\eta_{1/2}$ до $\eta_{L+1/2}$ по правилу средней точки и использование граничных условий приводит к выражению:

$$\left(B_{L+1/2} - B_{1/2} \right) \frac{\partial p_s}{\partial t} = - \sum_{l=1}^{l=L} \left(A_l p_0 D_l + B_l \nabla \cdot (p_s \vec{V})_l \right) \Delta \eta_l - \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \dot{\eta} \right)_{L+1/2}. \quad (\text{A.34})$$

Выражение для $\partial p_s / \partial t$ может быть получено при $L = \text{Nlev}$ в выражении (A.34) и использовании граничного условия $\dot{\eta}_{\text{Nlev}+1/2} = 0$. После подстановки полученного выражения в (A.34) для произвольного L получается выражение для $(\partial p / \partial \eta \cdot \dot{\eta})_{L+1/2}$. Слагаемое $\nabla \cdot (p_s \vec{V})$ вычисляется с помощью стандартного оператора дивергенции (см. пункт A.5.1).

A.5. Горизонтальные аппроксимации

В модели используется широтно-долготная сетка с переменным разрешением по широте. Сетка состоит из узлов, расположенных на широтах $\varphi = \varphi_j$, $j \in [0, \text{Nlat}]$ с шагом по долготе $\Delta \lambda$:

$$(\lambda, \varphi)_{ij} = (i \Delta \lambda, \varphi_j). \quad (\text{A.35})$$

Точки полюсов являются узлами сетки по широте.

Разнесение сетки по горизонтали не применяется, так как в качестве прогностических переменных используются вертикальная компонента завихренности и горизонтальная дивергенция. Компоненты скорости ветра, используемые как вспомогательные переменные, также хранятся в узлах (A.35).

А.5.1. Дискретизация операторов горизонтального градиента, дивергенции и вертикального компонента завихренности

Для вычисления оператора градиента применяется конечно-разностная формула четвертого порядка:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_{i+1/2} = \frac{\psi_{i-1} - 27\psi_i + 27\psi_{i+1} - \psi_{i+2}}{24\Delta x} + O(\Delta x^4), \quad (\text{A.36})$$

где x – одна из горизонтальных координат (φ либо λ), ψ – произвольная скалярная величина или компонента вектора. Значения производной в «полуцелых» узлах сетки $\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_{i+1/2}$ интерполируются в «целые» узлы с помощью лагранжевой интерполяции четвертого порядка точности.

Лагранжева интерполяция четвертого порядка точности применяется для получения значения векторных компонент в «полуцелых» узлах сетки при вычислении завихренности и дивергенции. Затем производная по широте вычисляется по локально-консервативной формуле второго порядка:

$$\frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial\psi \cos \varphi}{\partial\varphi} = \frac{\psi_{j+1/2} \cos \varphi_{j+1/2} - \psi_{j-1/2} \cos \varphi_{j-1/2}}{a(\sin \varphi_{j+1/2} - \sin \varphi_{j-1/2})} + O(\Delta\varphi^2), \quad (\text{A.37})$$

производные по долготе вычисляются с помощью формулы (A.36), как и в операторе градиента.

Учет переменного разрешения по широте в вычислении меридиональных производных, производится аналогично [108] с помощью введения псевдо-широты φ' , $\varphi'_j = -\pi/2 + j\Delta\varphi'$. Точки сетки равномерно распределены в координате φ' . Производная по широте вычисляется как

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial\varphi'} \frac{\partial\varphi'}{\partial\varphi}. \quad (\text{A.38})$$

Производная по псевдо-широте $\partial\psi/\partial\varphi'$ и обратный коэффициент растяжения $\mathcal{M} = \partial\varphi/\partial\varphi'$ вычисляются по формуле (A.36).

Производные по долготе вычисляются в сеточном пространстве, а для вычисления производных по широте используется представление Фурье по долготе:

$$\psi(\varphi_j, \lambda) = \hat{A}_0(\varphi_j)/2 + \sum_k (\hat{A}_k(\varphi_j) \cos(k\lambda) + \hat{B}_k(\varphi_j) \sin(k\lambda)). \quad (\text{A.39})$$

Задача сводится к вычислению производных по широте от коэффициентов \hat{A}_k , \hat{B}_k и обратному преобразованию Фурье.

При вычислении производных по широте около полюсов по формуле (A.36) необходимы значения ψ на «виртуальных» сеточных широтах $\varphi_{-1} = -\pi/2 - (\varphi_1 + \pi/2)$ и $\varphi_{Nlat+1} = \pi/2 + (\pi/2 - \varphi_{Nlat-1})$. Если продолжить линию меридиана на долготе λ за полюс, она совпадет с меридианом на долготе $\lambda + \pi$. Следовательно, $\psi(\varphi_{-1}, \lambda) = (-1)^\nu \psi(\varphi_1, \lambda + \pi)$, где $\nu = 0$ в случае скалярных величин и 1 для компонент векторов (что объясняется сменой ориентации базисных векторов при сдвиге по фазе на угол π). Легко показать, что $\hat{A}_k(\varphi_{-1}) = (-1)^{k+\nu} \hat{A}_k(\varphi_1)$, и аналогичные соотношения имеют место для $\hat{B}_k(\varphi_{-1})$, $\hat{A}_k(\varphi_{Nlat+1})$, $\hat{B}_k(\varphi_{Nlat+1})$.

Для вычисления завихренности и дивергенции на полюсах используется факт равенства нулю всех коэффициентов Фурье скалярной величины, кроме \hat{A}_0 (вытекающий из соображений однозначной определенности величины). Значение коэффициента \hat{A}_0 на полюсе получается по известным коэффициентам \hat{A}_0 на прилежащих широтах с помощью лагранжевой интерполяции четвертого порядка точности. Аналогично, векторные компоненты могут иметь только первые \hat{A}_1 , \hat{B}_1 ненулевые Фурье-коэффициенты на полюсах (что соответствует однозначно определенной векторной величине и базисным векторам, зависящим от долготы). Фурье-коэффициенты компонент градиента интерполируются в точку полюса.

A.5.2. Аппроксимация горизонтального оператора Лапласа

Оператор Лапласа

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{a^2 \cos^2 \varphi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^2} + \frac{1}{a^2 \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{A.40})$$

возникает в неявной части дискретизированного по времени уравнения дивергенции ($\nabla^2 \vec{G}^{n+1}$ в (A.21)).

Оператор Лапласа дискретизируется в пространстве коэффициентов Фурье по долготе. Долготная часть оператора представляет собой Фурье-образ опера-

ции двойного дифференцирования по долготе с применением формулы (A.36):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{a^2 \cos^2 \varphi} \frac{\partial^2 \exp(ik\lambda)}{\partial \lambda^2} = -\tilde{k}^2 \exp(ik\lambda) = \\ & = -\left(\frac{261 \sin(k\Delta\lambda) + \sin(3k\Delta\lambda) - 36 \sin(2k\Delta\lambda)}{192a \cos \varphi \Delta\lambda} \right)^2 \exp(ik\lambda). \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

По широте используется конечно-объемная дискретизация оператора Лапласа:

$$(\Delta\psi)_{\varphi,j} \approx \frac{1}{a^2(\sin \varphi_{j+\frac{1}{2}} - \sin \varphi_{j-\frac{1}{2}})} \left(\left(\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \cos \varphi_{j-\frac{1}{2}} \right). \quad (\text{A.42})$$

Для полюсных точек:

$$(\Delta\psi)_{N_\varphi} \approx \frac{1}{2\pi a^2(1 - \sin \varphi_{N_\varphi - \frac{1}{2}})} \sum_{i=1}^{N_\lambda} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right)_{i,N_\varphi - 1/2} \cos \varphi_{N_\varphi - \frac{1}{2}}, \quad (\text{A.43})$$

$$(\Delta\psi)_0 \approx \frac{1}{2\pi a^2(1 + \sin \varphi_{\frac{1}{2}})} \sum_{i=1}^{N_\lambda} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right)_{i,1/2} \cos \varphi_{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.44})$$

Для аппроксимации производных функций в полуцелых узлах в уравнениях (A.42)–(A.44) применяются формулы (A.36), (A.38).

A.5.3. Восстановление горизонтальной скорости по завихренности и дивергенции

Для восстановления компонент скорости горизонтального ветра по известной вертикальной компоненте относительной завихренности и горизонтальной дивергенции обращаются определения $\zeta = \vec{k} \cdot \nabla \times \vec{V}$ и $D = \nabla \cdot \vec{V}$. Для облегчения вычислений используется Фурье-представление по долготе (A.39). Выражения для нулевых Фурье-коэффициентов u и v записываются следующим образом:

$$\frac{\partial \hat{A}_0^u \cos \varphi}{\partial \varphi} = \hat{A}_0^\zeta a \cos \varphi, \quad (\text{A.45})$$

$$\frac{\partial \hat{A}_0^v \cos \varphi}{\partial \varphi} = \hat{A}_0^D a \cos \varphi. \quad (\text{A.46})$$

Эти выражения интегрируются по широте с использованием компактной формулы [109]:

$$\frac{1}{24} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right)_{j-1} + \frac{11}{12} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right)_j + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right)_{j+1} = \frac{\psi_{j+1/2} - \psi_{j-1/2}}{\Delta \varphi} + O(\Delta \varphi^4), \quad (\text{A.47})$$

где $\partial \psi / \partial \varphi$ соответствует $\hat{A}_0^\zeta \cos \varphi$ ($\hat{A}_0^D \cos \varphi$),

ψ соответствует $\hat{A}_0^u \cos \varphi$ ($\hat{A}_0^v \cos \varphi$).

Полученные Фурье-коэффициенты компонент горизонтального ветра в «полуцелых» узлах интерполируются в «целые» узлы с использованием компактной интерполяции шестого порядка [109].

Система уравнений для k -х Фурье-коэффициентов компонент горизонтального ветра:

$$\begin{cases} -k \hat{A}_k^v - \frac{\partial \hat{B}_k^u \cos \varphi}{\partial \varphi} = \hat{B}_k^\zeta a \cos \varphi, \\ k \hat{B}_k^u + \frac{\partial \hat{A}_k^v \cos \varphi}{\partial \varphi} = \hat{A}_k^D a \cos \varphi, \end{cases} \quad (\text{A.48})$$

$$\begin{cases} -k \hat{A}_k^u + \frac{\partial \hat{B}_k^v \cos \varphi}{\partial \varphi} = \hat{B}_k^D a \cos \varphi, \\ k \hat{B}_k^v - \frac{\partial \hat{A}_k^u \cos \varphi}{\partial \varphi} = \hat{A}_k^\zeta a \cos \varphi, \end{cases} \quad (\text{A.49})$$

где $\partial \psi / \partial \varphi$ аппроксимируется по схеме Нумерова:

$$\frac{1}{6} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right)_{j-1} + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right)_j + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right)_{j+1} = \frac{\psi_{j+1} - \psi_{j-1}}{2 \Delta \varphi} + O(\Delta \varphi^4). \quad (\text{A.50})$$

Если $\vec{\hat{A}}_k^\psi$, $\vec{\hat{B}}_k^\psi$ – столбцы из $N_{\text{lat}} + 1$ компонент с j -й компонентой, представляющей \hat{A}_k^ψ , \hat{B}_k^ψ на j -й сеточной широте, то систему (A.48) можно записать в виде:

$$\begin{cases} -k \vec{\hat{A}}_k^v - \frac{1}{2 \Delta \varphi} \mathbf{M}^{-1} \delta \mathbf{C} \vec{\hat{B}}_k^u = a \mathbf{C} \vec{\hat{B}}_k^\zeta, \\ k \vec{\hat{B}}_k^u + \frac{1}{2 \Delta \varphi} \mathbf{M}^{-1} \delta \mathbf{C} \vec{\hat{A}}_k^v = a \mathbf{C} \vec{\hat{A}}_k^D, \end{cases} \quad (\text{A.51})$$

где \mathbf{C} – диагональная матрица с $\mathbf{C}_{jj} = \cos \varphi_j$,

δ – оператор $(\delta \vec{\hat{A}})_j = \hat{A}_{j+1} - \hat{A}_{j-1}$,

\mathbf{M} – матрица с диагоналями $(1/6, 2/3, 1/6)$.

Система уравнений (A.51) умножается на матрицу \mathbf{M} слева и переписывается

для двухкомпонентных векторов $(\hat{A}_k^v, \hat{B}_k^u)_j^T$, $j \in [0, Nlat]$, что приводит к блочно-трехдиагональной системе уравнений с блоками размера 2×2 . Те же операции, повторенные для системы (A.49), приводят к аналогичной системе уравнений для векторов $(\hat{A}_k^u, \hat{B}_k^v)_j^T$. Блочно-трехдиагональные системы решаются с помощью алгоритма векторной прогонки.

Данный алгоритм восстановления скоростей подробно описан в [110]. Использование этого алгоритма позволяет избежать решения задач Пуассона на сфере, что требует определенной осторожности из-за нетривиального ядра оператора Лапласа.

A.5.4. Решение уравнения Гельмгольца

При численном решении уравнения Гельмгольца вида

$$-\nabla^2\psi + \mu^2\psi = r, \quad (\text{A.52})$$

где ψ – искомая функция-решение,

μ – известная константа,

r – известная правая часть

используется дискретизация оператора Лапласа, описанная в пункте A.5.2 (уравнения (A.42)–(A.44)).

В силу того, что дискретизация оператора Лапласа (A.42)–(A.44) использует представление Фурье по долготе, задача сводится к решению одномерных задач по широте для каждой Фурье гармоники. Матрица широтной части дискретного оператора Лапласа – пятидиагональная. Результирующая система уравнений решается методом пятидиагональной прогонки.

A.5.5. Гипер-диффузия с бигармоническим оператором

Нелинейные взаимодействия в реальных крупномасштабных атмосферных течениях приводят к генерации все более и более мелких вихрей, пока энергия этих вихрей не обращается в тепло посредством молекулярной вязкости на

масштабах порядка 1 см. Подобное разрешение недостижимо в реальной глобальной модели атмосферы. Следовательно, чтобы избежать накопления энергии в мельчайших разрешаемых масштабах, нужна параметризация взаимодействия и диссипации на масштабах меньше размера ячеек сетки. Подобные параметризации часто рассматриваются как неотъемлемая часть динамического ядра [7]. В модели используется неявная по времени гипер-диффузия с бигармоническим оператором, которая селективно подавляет кратчайшие разрешаемые на сетке волны. Уравнение диффузии дискретизируется в пространстве коэффициентов Фурье по долготе с использованием метода конечных объемов.

Уравнение диффузии записывается как

$$\psi_f^{n+1} = \psi^{n+1} - \alpha K \Delta t \nabla^4 \psi_f^{n+1} - (1 - \alpha) K \Delta t \nabla^4 \psi^{n+1}, \quad (\text{A.53})$$

где ψ_f^{n+1} – сглаженное поле, полученное в результате решения уравнения диффузии;

ψ^{n+1} – одна из величин D^{n+1} , T_v^{n+1} , ζ^{n+1} , $\dot{\eta}^{n+1}$;

$\alpha \in [0,5,1]$ – коэффициент децентрирования по времени.

В уравнении (A.53) применяется неявная схема по времени, что позволяет обойти жесткое ограничение на коэффициент K около полюсов широтно-долготной сетки, величина Δt совпадает с шагом по времени в остальных блоках модели.

В модели используются сетки с переменным разрешением по широте, следовательно, фильтр не должен чрезмерно подавлять мелкомасштабные особенности полей в областях с высоким разрешением. Однако эти особенности должны быть полностью отфильтрованы до того, как они попадут в области с низким разрешением, где они не могут быть воспроизведены. Используется анизотропный коэффициент диффузии, зависящий от разрешения по широте, оператор ∇^4 заменяется на $\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla^3 \psi)$ для сохранения локальной консервативности, $\mathbf{K} = \text{diag}(K_\lambda, K_\varphi)$. Для облегчения численного решения уравнение (A.53) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} \psi_f^{n+1} &= \psi^{n+1} - \alpha \Delta t \nabla \cdot \mathbf{K} \nabla \xi - (1 - \alpha) \Delta t \nabla \cdot \mathbf{K} \nabla^3 \psi^{n+1}, \\ \xi &= \nabla^2 \psi_f^{n+1}. \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

Для аппроксимации широтной части операторов $\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla$ и ∇^2 используется конечно-объемная формула второго порядка точности:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla \xi)_\varphi = & \frac{1}{a^2 \Delta(\sin \varphi)_j} \left(K_{\varphi_{j+1/2}} \cos \varphi_{j+1/2} \frac{\xi_{j+1} - \xi_j}{\Delta \varphi_{j+1/2}} - \right. \\ & \left. - K_{\varphi_{j-1/2}} \cos \varphi_{j-1/2} \frac{\xi_j - \xi_{j-1}}{\Delta \varphi_{j-1/2}} \right) + O(\Delta \varphi^2) \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

где $\varphi_{j+1/2} = 1/2(\varphi_j + \varphi_{j+1})$,

$$\Delta \varphi_{j+1/2} = \varphi_{j+1} - \varphi_j,$$

$$\Delta(\sin \varphi)_j = \sin \varphi_{j+1/2} - \sin \varphi_{j-1/2}.$$

Долготная часть операторов $\nabla \cdot \vec{K} \nabla$ и ∇^2 аппроксимируется в пространстве коэффициентов Фурье как образ конечно-объемной формулы второго порядка.

Систему уравнений (A.54) с использованием дискретизации (A.55) для k -го Фурье-коэффициента можно записать как

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} \xi \\ \psi_f^{n+1} \end{pmatrix}_{j-1} + \mathbf{B} \begin{pmatrix} \xi \\ \psi_f^{n+1} \end{pmatrix}_j + \mathbf{C} \begin{pmatrix} \xi \\ \psi_f^{n+1} \end{pmatrix}_{j+1} = \frac{a^2 \Delta(\sin \varphi)_j}{\Delta t} \mathbf{R}_{diff}, \quad (\text{A.56})$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha K_{\varphi_{j-1/2}} \frac{\cos \varphi_{j-1/2}}{\Delta \varphi_{j-1/2}} & 0 \\ 0 & \frac{\cos \varphi_{j-1/2}}{\Delta \varphi_{j-1/2}} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.57})$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \alpha K_{\varphi_{j+1/2}} \frac{\cos \varphi_{j+1/2}}{\Delta \varphi_{j+1/2}} & 0 \\ 0 & \frac{\cos \varphi_{j+1/2}}{\Delta \varphi_{j+1/2}} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.58})$$

$$\mathbf{B} = -\mathbf{A} - \mathbf{C} - \begin{pmatrix} \alpha \frac{\tilde{k}^2 K_{\lambda_j} \Delta(\sin \varphi)_j}{\cos^2 \varphi_j} & -\frac{a^2 \Delta(\sin \varphi)_j}{\Delta t} \\ a^2 \Delta(\sin \varphi)_j & \frac{\tilde{k}^2 \Delta(\sin \varphi)_j}{\cos^2 \varphi_j} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.59})$$

$$\mathbf{R}_{diff} = \begin{pmatrix} \psi^{n+1} - (1 - \alpha) \Delta t \nabla \cdot \mathbf{K} \nabla^3 \psi^{n+1} \\ 0 \end{pmatrix}_j, \quad (\text{A.60})$$

где $-\tilde{k}^2 = -(1 - \cos k \Delta \lambda) / \Delta \lambda^2$ – Фурье-образ долготной части дискретного оператора Лапласа.

Полученная система уравнений решается с помощью блочно-трехдиагональной прогонки.

А.6. Организация параллельной структуры модели ПЛАВ

Важным аспектом программной реализации гидродинамической модели атмосферы является организация параллельной инфраструктуры, необходимой для возможности проведения модельных расчетов на системах, использующих вычислительные узлы с распределенной и общей памятью. Для возможности распараллеливания кода модели на узлах с распределенной памятью используется технология MPI (Message Passing Interface). Применение технологии MPI является одним из наиболее распространенных подходов при разработке высокопроизводительных приложений для обмена сообщениями между параллельными процессами на вычислительных системах с распределенной памятью. В дополнении к MPI-распараллеливанию кода программного комплекса модели также применяется технология OpenMP (Open Multi-Processing) для использования параллелизма вычислительных узлов с общей памятью. OpenMP - открытый стандарт для распараллеливания программ на языках C, C++ и Fortran. Данный стандарт дает описание совокупности директив компилятора, библиотечных процедур и переменных окружения, которые предназначены для программирования многопоточных приложений на многопроцессорных системах с общей памятью. При использовании технологии OpenMP параллельные вычисления реализуются при помощи использования нескольких потоков (нитей), порождаемых головным потоком (мастер-поток).

А.6.1. Организация MPI распараллеливания

Основным механизмом коммуникации между MPI-процессами является прием и отправка сообщений. При этом группы процессов объединены в так называемые коммутаторы, в рамках которых каждому MPI-процессу присвоен номер (ранг), позволяющий осуществлять адресную отставку и прием сообщений. Помимо этого, в рамках коммутатора определены коллективные операции (обмены типа каждый-с-каждым, операции распределения и сбора).

Для организации параллельного исполнения кода модели ПЛАВ используется геометрический подход к распределению вычислительной нагрузки между

MPI-процессами, то есть расчетная область модели делится на подобласти, количество которых равно количеству MPI-процессов, и каждый MPI-процесс осуществляет вычисления в рамках узлов расчетной сетки, принадлежащих данной подобласти.

Расчетная область модели в случае использования регулярной широтно-долготной сетки представляет собой параллелепипед с измерениями (долгота, широта, высота). Для реализации некоторых алгоритмов используется представление сеточных полей модели ПЛАВ по долготе в виде коэффициентов разложения в дискретный ряд Фурье. В этом случае расчетная область представляет собой параллелепипед с измерениями (волновое число, широта, высота). В большей части модели используется одномерная декомпозиция области между MPI-процессами по широте, то есть каждому MPI-процессу соответствует параллелепипед, определяемый начальным и конечным номером широты. В части кода модели используется одномерная декомпозиция вдоль волновых чисел, то есть параллелепипед расчетной области разрезается на полосы вдоль оси волновых чисел. При переходе между частями кода модели, использующими декомпозицию области по широте и по волновым числам, применяется так называемый алгоритм транспозиции данных в результате работы которого данные перераспределяются между MPI-процессами таким образом, чтобы перейти к новой распределенной размерности. Реализация этого алгоритма требует выполнения параллельного обмена типа каждый-с-каждым.

Для параллельного исполнения ряда операций в модели (например, вычисление разностных операторов вдоль широты) требуется наличие значений элементов массивов в узлах расчетной области, которые не принадлежат данному MPI-процессу и должны быть получены в ходе обмена сообщениями между MPI-процессами. Как правило требуются значения элементов массивов из областей, прилежащих к границам расчетной области данного MPI-процесса и имеющих небольшой фиксированный размер вдоль распределенной размерности. Такие области обычно называют буферными или гало зонами, а параллельные обмены значениями в гало зонах – гало обменами. Для удобства программной реализации гало обменов между MPI-процессами, часть массивов может быть инициализирована с расширением количества узлов вдоль распределенной размерности для удобства хранения значений полей в гало зонах. То есть если расчетная область для данного MPI-процесса задается как $(1 : NLON, 1 : NLEV, JS : JE)$, где $NLON$ – количество узлов сетки вдоль долготы, $NLEV$

– количества вертикальных уровней сетки, Y_S , Y_E – границы расчетной области вдоль широты для данного MPI-процесса, то размер инициализируемого массива с включением гало зоны будет задаваться как $(1:N_{LON}, 1:N_{LEV}, JS-NVJ:JE+NVJ)$, где NVJ – ширина гало зоны. На рисунке A.1 изображено схематичное представление расчетных и гало зон MPI-процесса при использовании одномерной декомпозиции вдоль широты (ось Y).

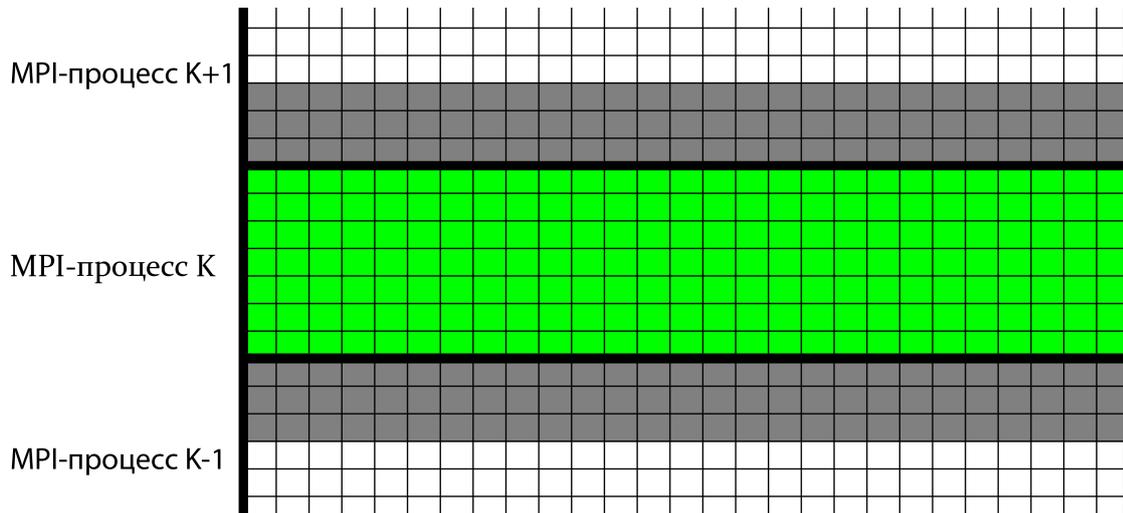


Рисунок A.1 – Схематичное изображение расчетных и гало зон при использовании MPI распараллеливания. Ячейки закрасенные зеленым цветом – расчетные точки, принадлежащие MPI-процессу с номером K . Ячейки закрасенные серым цветом – гало зоны, содержащие значения сеточных полей в узлах сетки, принадлежащих расчетным зонам MPI-процессов с номерами $K - 1$, $K + 1$.

A.6.2. Организация OpenMP распараллеливания

В дополнение к распараллеливанию с помощью технологии MPI, используется OpenMP распараллеливание части циклов модели. Применение OpenMP позволяет увеличить количество эффективно используемых процессорных ядер вычислительной системы. OpenMP распараллеливание реализуется путем дополнительного разбиения расчетной области, приходящейся на каждый MPI-процесс, вдоль нераспределенной размерности (долгота, высота, волновое

число) на подобласти, количество которых равно количеству параллельных потоков. Реализация OpenMP распараллеливания происходит путем добавления в текст программы специальных директив препроцессора непосредственно до и после тела цикла. На рисунке А.2 схематично проиллюстрирован пример одного из используемых в модели ПЛАВ разбиения расчетной области при одновременном использовании OpenMP и MPI распараллеливания.

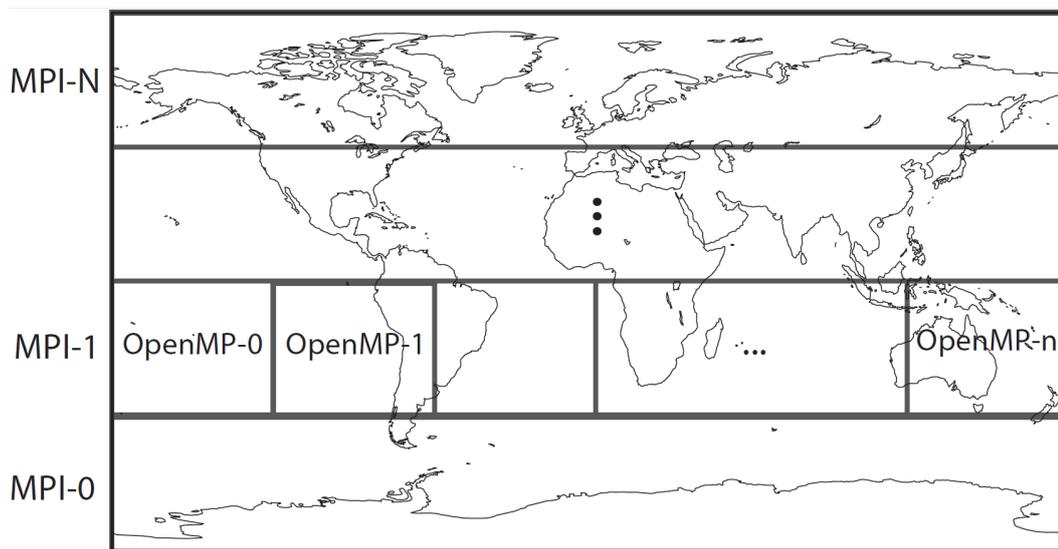


Рисунок А.2 — Схематичное изображение распределения расчетной области по MPI-процессам (вдоль широты) и нитям OpenMP (вдоль долготы). Источник рисунка – работа [23]