На правах рукописи

Гойман Гордей Сергеевич

Масштабируемые полунеявные алгоритмы интегрирования глобальных моделей атмосферной циркуляции

Специальность 1.2.2 —
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук.

Научный руководитель:	**Толстых Михаил Андреевич,** доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН
Официальные оппоненты:	**Некто 1,** доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института 1 РАН
	Некто 2, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института 2 РАН
Ведущая организация:	Институт 3

Защита диссертации состоится ДАТА в X часов на заседании диссертационного совета Номер диссовета, созданного на базе Института 4, расположенного по адресу: Адрес учреждение диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Автореферат, название библиотеки и на сайте https://.

Автореферат разослан «___» _______________ 2022 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Номер диссовета,
кандидат физико-математических наук Некто 3

Общая характеристика работы

Актуальность темы. 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 этих процессов 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. Мировым лидером по точности прогноза является Европейский центр среднесрочного прогноза погоды, модель которого имеет разрешение 9 км, расчеты производятся с использованием 12000 ядер. Самые скромные требования к вычислительным ресурсам у модели ПЛАВ [1], 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 вычислительных ядер, чтобы соответствовать требованиям к оперативности расчетов.

[1] 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.

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 2-ого) 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.

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 параллельный алгоритм решения уравнений эллиптического типа, характерных для полунеявных 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 "C" 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. Реализован 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. Повышение вычислительной и параллельной эффективности программного комплекса глобальной модели атмосферы ПЛАВ.

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 "CPT1617", 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 [1—10], из них 4 работы [1—4] в рецензируемых изданиях, которые индексируются в международных базах данных Scopus или Web of Science; 5 работ [5—9] опубликованы в сборниках трудов конференций, 1 работа [10] – 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 объём диссертации составляетСписок литературы содержит 109 наименований.

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

Содержание работы

Во **введении** приводится обзор литературы, обосновывается актуальность работы, формулируется цель работы и ставятся задачи, необходимые для её достижения. Излагается практическая значимость, научная новизна и положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена построению и исследованию свойств горизонтальных дискретизаций на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных на сфере.

В *разделе 1.1* приводятся различные формулировки модельных уравнений мелкой воды на сфере.

В *разделе 1.2* вводится понятие редуцированной широтно-долготной сетки с разнесением переменных, которая определяется 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 $\Delta\lambda_j = 2\pi/N_j^\lambda$, $\Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = 2\pi/N_{j+\frac{1}{2}}^\lambda$. Скалярные величины (геопотенциал уровня жидкости, горизонтальная дивергенция, ...) располагаются в узлах сетки с координатами φ_j, $\lambda_{i,j} = (i-1)\Delta\lambda_j$, зональные компоненты векторов расположены в узлах сетки с координатами φ_j, $\lambda_{i-\frac{1}{2},j} = (i - \frac{3}{2})\Delta\lambda_j$, меридиональные компоненты векторов определены в узлах сетки с координатами $\varphi_{j+\frac{1}{2}}$, $\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} = (i-1)\Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}}$. Схематичное изображение участка редуцированной сетки с разнесением переменных приведено на Рисунке 1. Значения сеточных функций q в узлах сетки с координатами φ_j, $\lambda_{i,j}$ обозначаются как

$q_{i,j}$. Вектор, содержащий значения сеточной функции вдоль круга фиксированной широты, обозначается $q_j = \left(q_{1,j},\, q_{2,j}, \ldots, q_{N_j^\lambda,j}\right)^{\mathrm{T}}$.

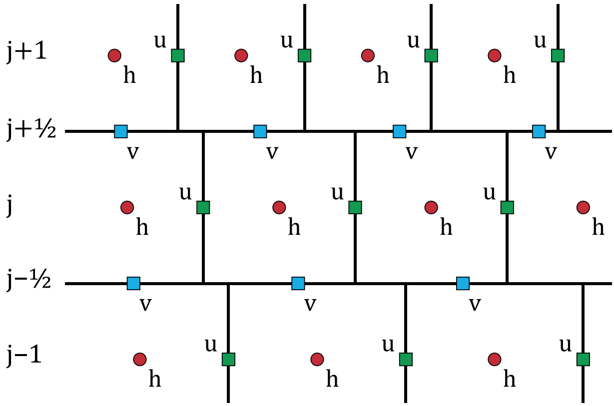

Рис. 1 — Схематичное изображение расположения узлов редуцированной широтно-долготной сетки с разнесением переменным.

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. Для решения этой проблемы предлагается использовать процедуры 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 широтно-долготной сетки в качестве основы, дополняя их соответствующими процедурами одномерной интерполяции вдоль долготы.

В *разделе 1.3* в рамках линеаризованных уравнений мелкой воды на сфере исследуются свойства предложенных дискретизаций на редуцированной широтно-долготной сетке с разнесением переменных. Исследуемые разностные схемы основанны на схемах второго порядка точности для регулярной широтно-долготной сетки. Полудискретная система уравнений записывается в виде:

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} - (fv)_j + (\mathrm{grad}_\lambda h)_j = 0, \tag{1}$$

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

$$\frac{\partial h_j}{\partial t} + H\left[(\mathrm{div}_\lambda u)_j + (\mathrm{div}_\varphi v)_j\right] = 0. \tag{3}$$

Здесь u_j – значения зональной компоненты вектора скорости ветра в узлах сетки, расположенных вдоль круга фиксированной широты φ_j, $v_{j+1/2}$ – значения меридиональной компоненты вектора скорости ветра в узлах сетки, расположенных вдоль круга фиксированной широты $\varphi_{j+1/2}$, h_j – отклонение высоты уровня жидкости от постоянного значения H в узлах сетки, расположенных вдоль круга фиксированной широты φ_j.

Общий вид рассматриваемых дискретизаций:

$$(\mathrm{grad}_\varphi h)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{W^{j+1}_{j+\frac{1}{2}} h_{j+1} - W^{j}_{j+\frac{1}{2}} h_j}{\mathrm{a}\Delta\varphi_{j+\frac{1}{2}}}, \tag{4}$$

$$(\mathrm{div}_\varphi v)_j = \frac{W_j^{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}} \cos\varphi_{j+\frac{1}{2}} - W_j^{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}} \cos\varphi_{j-\frac{1}{2}}}{\mathrm{a}\cos\varphi_j \Delta\varphi_j}, \tag{5}$$

$$(fv)_j = \frac{1}{2\cos\varphi_j}\left(S_j^{j+\frac{1}{2}}(v\cos\varphi)_{j+\frac{1}{2}} + S_j^{j-\frac{1}{2}}(v\cos\varphi)_{j-\frac{1}{2}}\right)\circ f_j, \tag{6}$$

$$(fu)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\Delta\varphi_{j+\frac{1}{2}}}\left(S^{j+1}_{j+\frac{1}{2}}(f\circ u\Delta\varphi)_{j+1} + S^{j}_{j+\frac{1}{2}}(f\circ u\Delta\varphi)_j\right). \tag{7}$$

W, S – матрицы, соответствующие одномерным интерполяционным процедурам вдоль долготы.

В *подразделе 1.3.1* исследуются свойства консервативности предложенных дискретизаций. Сформулированы и доказаны необходимые и достаточные условия наличия аналогов законов сохранения массы и энергии. Полученные условия приведены в Таблице 1.

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)	$W^j_{j+\frac{1}{2}}\Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = (W_j^{j+\frac{1}{2}})^T\Delta\lambda_j$
Сохранение энергии (сила Кориолиса)	$S^j_{j+\frac{1}{2}}\Delta\lambda_{j+\frac{1}{2}} = (S_j^{j+\frac{1}{2}})^T\Delta\lambda_j$

Таблица 1 — Краткое описание ограничений на интерполяционные матрицы, обеспечивающие свойства консервативности.

В *подразделе 1.3.2* исследуется вопрос возможности возникновения дополнительных вычислительных стационарных мод.

В *подразделе 1.3.3* предложен подход для построения интерполяционных процедур, отвечающих полученным в подразделе 1.3.1 условиям. Предложенный подход основан на применении операторов продолжения (переход от сеточных функций к функциям непрерывного аргумента) и ограничения (переход от функций непрерывного аргумента к сеточным функциям). Интерполяционный оператор представляет собой комбинацию оператора продолжения и оператора ограничения.

В *разделе 1.3.4* приведены результаты численных экспериментов для рассматриваемых дискретизаций. Исследуется порядок сходимости и спектр дискретного оператора Лапласа $L = (\mathrm{div}_\lambda \mathrm{grad}_\lambda + \mathrm{div}_\varphi \mathrm{grad}_\varphi)$, дисперсионные характеристики численных гравитационных волн, аппроксимация силы Кориолиса, проверяется точность и выполнение законов сохранения в рамках теста "геострофически сбалансированное течение". Показано, что предложенные схемы демонстрируют свойства, близкие к свойствам схем на регулярной широтно-долготной сетке с разнесением переменных.

В *разделе 1.4* рассматривается полунеявная полулагранжева модель мелкой воды на вращающейся сфере, основанная на применении предложенного автором подхода для пространственной дискретизации уравнений на редуцированной сетке с разнесением переменных.

Полудискретная система уравнений:

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = C_u v - \mathrm{grad}_\lambda \left(gh + gh^s\right), \tag{8}$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = C_v u - \mathrm{grad}_\varphi \left(gh + gh^s\right), \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -h \left(\mathrm{div}_\lambda u + \mathrm{div}_\varphi v\right). \tag{10}$$

Здесь $C_u v$, $C_v u$ – аппроксимация силы Кориолиса в u и v узлах сетки, h^s – высота уровня поверхности (орографии).

Для дискретизации уравнений по времени используется полунеявный полулагранжев метод. Для линейных членов уравнений применяется схема Кранк-Николсон, для нелинейных членов уравнений и процедуры вычисления траекторий полулагранжевых частиц применяется схема SETTLS[2].

В *подразделе 1.4.1* приводится описание пространственной дискретизации уравнений. В качестве процедуры одномерной интерполяции вдоль долготы применяется 5-ти точечная кусочно-тригонометрическая интерполяция:

$$L_k(\lambda) = \sum_{i=k-2}^{k+2} t_i^k(\lambda) f_i, \tag{11}$$

$$t_i^k(\lambda) = \prod_{\substack{m=k-2 \\ m\neq i}}^{k+2} \frac{\sin\left[(\lambda \ \ - \lambda_m)/2\right]}{\sin\left[(\lambda_i - \lambda_m)/2\right]}. \tag{12}$$

[2]Hortal, M. The development and testing of a new two-time-level semi-Lagrangian scheme (SETTLS) in the ECMWF forecast model / M. Hortal // Q. J. Roy. Meteor. Soc. – 2002. – Т. 128, № 583. – С. 1671—1687.

Здесь $L_k(\lambda)$ – интерполяционный полином на промежутке $[\lambda_k - \Delta\lambda/2, \lambda_k + \Delta\lambda/2]$. Такая интерполяционная процедура точна для функций $\sin m\lambda$, $\cos m\lambda$, $m \leqslant 2$ и обладает 4-м порядком аппроксимации. Пространственная дискретизация уравнений вдоль меридионального направления основана на применении формул 4-го порядка аппроксимации:

$$(\mathrm{div}_\varphi v)_j = \frac{27\left(W_j^{j+\frac{1}{2}}\tilde{v}_{j+\frac{1}{2}} - W_j^{j-\frac{1}{2}}\tilde{v}_{j-\frac{1}{2}}\right) - \left(W_j^{j+\frac{3}{2}}\tilde{v}_{j+\frac{3}{2}} - W_j^{j-\frac{3}{2}}\tilde{v}_{j-\frac{3}{2}}\right)}{24\mathrm{a}\cos\varphi_j\Delta\varphi_j}. \tag{13}$$

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

$$(\mathrm{grad}_\varphi h)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{27\left(W_{j+\frac{1}{2}}^{j+1}h_{j+1} - W_{j+\frac{1}{2}}^{j}h_j\right) - \left(W_{j+\frac{1}{2}}^{j+2}h_{j+2} - W_{j+\frac{1}{2}}^{j-1}h_{j-1}\right)}{24\mathrm{a}\Delta\varphi_{j+\frac{1}{2}}}. \tag{14}$$

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

Для приближенного вычисления производной вдоль долготы используется формула 4-го порядка аппроксимации:

$$(\delta_\lambda q)_{i,j} = \frac{(2\cos\frac{\Delta\lambda_j}{2} + 1)^2(q_{i+\frac{1}{2},j} - q_{i-\frac{1}{2},j}) - \frac{1}{4\cos^2\frac{\Delta\lambda_j}{2} - 1}(q_{i+\frac{3}{2},j} - q_{i-\frac{3}{2},j})}{4\sin\Delta\lambda_j(\cos\frac{\Delta\lambda_j}{2} + 1)} \tag{15}$$

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:

$$(\mathrm{div}_\lambda u)_{i,j} = \frac{(\delta_\lambda u)_{i,j}}{\mathrm{a}\cos\Delta\varphi_j}, \tag{16}$$

$$(\mathrm{grad}_\lambda \Phi)_{i,j} = \frac{(\delta_\lambda \Phi)_{i,j}}{\mathrm{a}\cos\Delta\varphi_j}. \tag{17}$$

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

$$(C_u v)_j = \frac{f_j}{\cos\varphi_j} \circ \sum_{k=-2}^{1} c_j^{j+\frac{1}{2}+k} S_j^{j+\frac{1}{2}+k}\tilde{v}_{j+\frac{1}{2}+k}, \tag{18}$$

$$(C_v u)_{j+\frac{1}{2}} = f_{j+\frac{1}{2}} \circ \sum_{k=-1}^{2} c_{j+\frac{1}{2}}^{j+k} S_{j+\frac{1}{2}}^{j+k} u_{j+k}. \tag{19}$$

Здесь $c_j^{j+\frac{1}{2}+k}$, $c_{j+\frac{1}{2}}^{j+k}$ – коэффициенты кусочно-кубической Лагранжевой интерполяции. Интерполяция значений сеточных функций в исходные точки полулагранжевых траекторий производится с использованием комбинированной кусочно-полиномиальной (вдоль широты), кусочно-тригонометрической (вдоль долготы) интерполяции.

В *подразделе 1.4.2* описываются результаты численных экспериментов. Была исследована сходимость реализованных дискретных операторов, проведены эксперименты "геострофический баланс"[3] , "баротропная неустойчивость"[4] . Результаты численных экспериментов показали близость полученных решений к результатам, полученным с использованием регулярной сетки с разнесением переменных.

В *разделе 1.5* приведен обзор основных результатов данной Главы.

Во **второй главе** приводится описание разработанного автором параллельного многосеточного алгоритма решения уравнений эллиптического типа на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере. Необходимость решения уравнений эллиптического типа в моделях динамики атмосферы возникает в результате применения неявных методов интегрирования по времени.

В *разделе 2.1* вводится в рассмотрение модельное уравнение, используемое для тестирования предложенного алгоритма. В качестве модельного уравнения используется уравнение Гельмгольца, возникающее в результате применения полунеявного полулагранжевого метода интегрирования по времени для нелинейных уравнений мелкой воды. Производится анализ этого уравнения. Показано, что число обусловленности матрицы, возникающей в результате дискретизации по пространству модельного уравнения, определяется числом Куранта для численных гравитационных волн.

В *разделе 2.2* приводится описание геометрического многосеточного алгоритма. Одним из основных компонентов алгоритма является предложенное автором обобщение метода условного сгрубления сетки на случай редуцированной сетки (пример работы метода приведен на рисунке). В качестве операторов продолжения и сгрубления предлагается использовать билинейную интерполяцию и осреднение по объему, в качестве оператора сглаживания – метод Якоби.

В *разделе 2.3* описывается параллельная реализация предложенного алгоритма. Для распараллеливания используется технология MPI. Алгоритм двумерной декомпозиции области по MPI-процессам основан рекурсивном алгоритме разбиения сферы на области равного диаметра. Реализована возможность балансировки вычислительной нагрузки. Также реализована библиотека

[3] 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. – Т. 102, № 1. – С. 211—224.

[4] 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. – Т. 56, № 5. – С. 429—440.

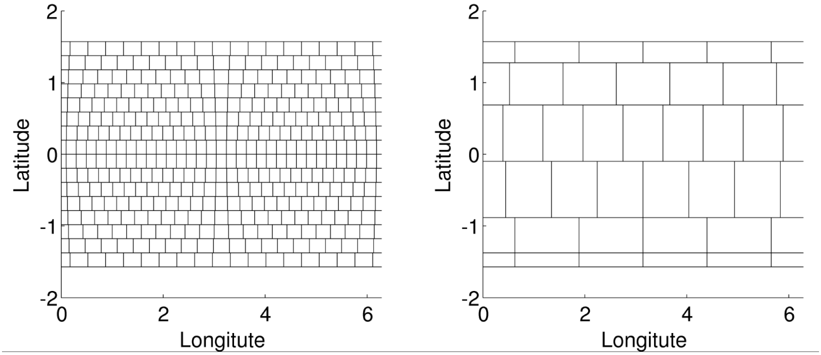

Рис. 2 — Пример применения двух итераций предложенного алгоритма условного сгрубления для редуцированной широтно-долготной сетки.

параллельных обменов, реализующая подготовку и выполнение обменов данными в ячейках сетки, расположенных в гало зонах, между MPI-процессами, а также процедуры ввода/вывода с использованием мастер-процесса.

В *разделе 2.4* приводятся результаты численных экспериментов.

В *подразделе 2.4.1* исследуется сходимость предложенного алгоритма. Показано, что метод обладает высокой скоростью сходимости, практически не зависящей от размерности и конфигурации редуцированной сетки.

В *подразделе 2.4.2* исследуется параллельная масштабируемость алгоритма. Показано, что реализованный алгоритм позволяет эффективно использовать как минимум 4608 процессорных ядер для сетки с горизонтальным разрешением около 20 км.

В *разделе 2.5* представлены основные результаты второй главы.

В **третьей главе** приводится описание выполненных автором диссертации работ, целью которых является повышение параллельной и вычислительной эффективности программного комплекса глобальной модели атмосферы ПЛАВ. Данная глава включает в себя четыре раздела.

В *разделе 3.1* рассматривается внедрение в модель ПЛАВ полулагранжевого алгоритма адвекции с динамической адаптацией параллельных обменов. Ширина гало-зоны в полулагранжевом блоке в исходной версии модели является постоянной предзаданной величиной и рассчитывается на основе глобальной оценки максимального значения меридиональной компоненты вектора скорости ветра. Такая оценка области параллельной зависимости является довольно грубой, так как в регионах с малой скоростью ветра для вычислений может требоваться гораздо меньшее количество данных, лежащих за пределами расчетной области данного MPI-процесса. Для оптимизации алгоритма предлагается на каждом шаге по времени производить уточнение ширины параллельных обменов для каждого MPI-процесса в зависимости от положения наиболее удаленной начальной точки полулагранжевой траектории. Идея

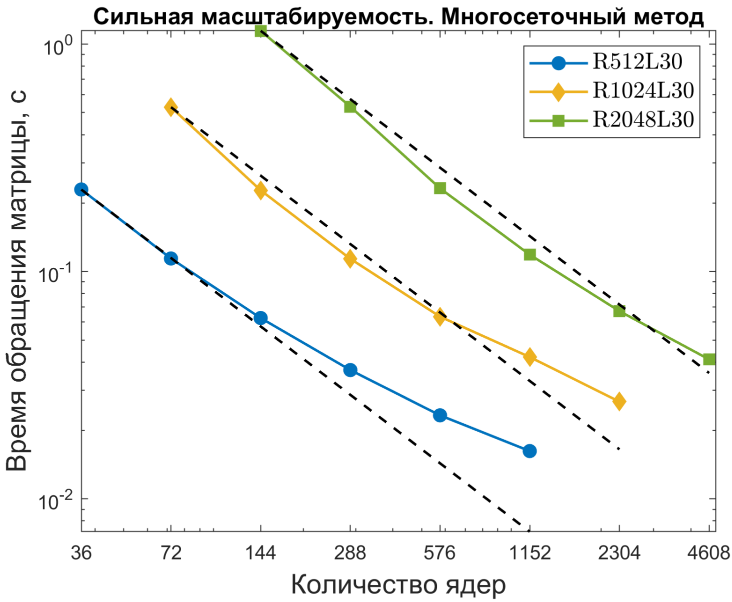

Рис. 3 — Сильная масштабируемость многосеточного алгоритма. Число после R в обозначении сетки – количество узлов сетки вдоль долготы на экваторе, число после L – число вертикальных уровней расчетной сетки.

данного подхода показана на Рисунке 4. Внедрение данной модификации позволяет повысить масштабируемость кода модели, при этом новая версии модели достигает параллельной эффективности около 53% при использовании 13608 процессорных ядрах на сетке $3024 \times 1513 \times 126$ (Рисунок 5).

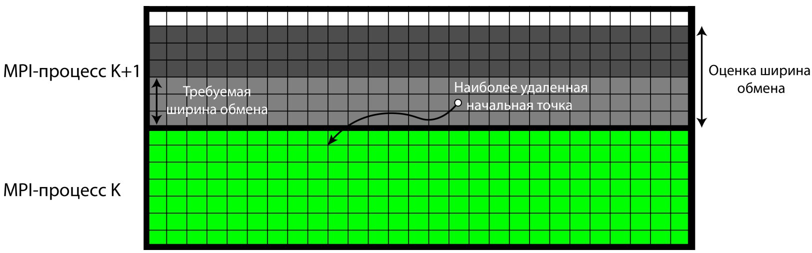

Рис. 4 — Область параллельной зависимости в полулагранжевом блоке. Априорная оценка – темно-серый цвет, оценка, основанная на положении начальных точки полулагранжевых траекторий – серый цвет.

В *разделе 3.2* приведено описание работ по внедрению в модель ПЛАВ вычислений и обменов с использованием чисел с плавающей точкой одинарной точности. Одинарная точность внедряется в блок полулагранжевой адвекции

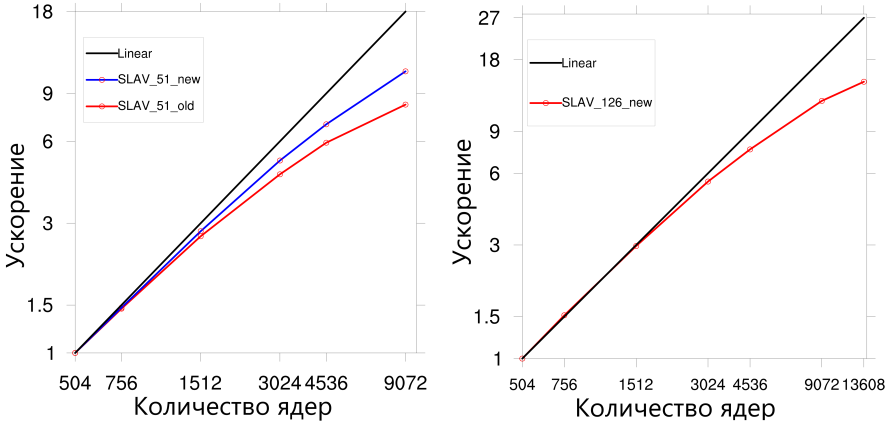

Рис. 5 — Сильная масштабируемость кода модели ПЛАВ. Левый рисунок – сравнение версий с фиксированной (красная линия) и адаптируемой (синия линия) шириной обмена на сетке $3024 \times 1513 \times 51$. Правый рисунок – версия с адаптируемой шириной обмена на сетке $3024 \times 1513 \times 126$.

и блок решения эллиптических уравнений. В блоке полулагранжевой адвекции одинарная точность используется для выполнения параллельных обменов, необходимых для поиска начальных точек полулагранжевых траекторий и интерполяции значений функции в эти точки. В блоке решения эллиптических уравнений одинарная точность применяется для осуществления глобальной транспозиции данных (глобальное перераспределение данных между процессами, требующее параллельного взаимодействия типа "каждый-с-каждым"). Использование одинарной точности позволяет вдвое уменьшить размер передаваемых данных и снижает нагрузку на память при вычислениях. Показано, что внедрение одинарной точности не приводит к существенному ухудшению воспроизведения динамики атмосферы, при этом позволяет заметно сократить время расчетов.

В *разделе 3.3* представлены модификации кода модели ПЛАВ нацеленные на оптимизацию работы с памятью процессора. Эти модификации включают управление длиной векторов в блоке параметризаций физических процессов подсеточного масштаба и изменение структуры хранения вектора-состояния модели. Идея первой модификации 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. Для этого производится декомпозиция всей вычислительной области на маленькие блоки фиксированного размера, которые распределяются по OpenMP-потокам (нитям). Показано, что внедрение данной модификации позволяет сократить время расчетов в блоке параметризаций на 20-30% в зависимости от разрешения сетки модели ПЛАВ.

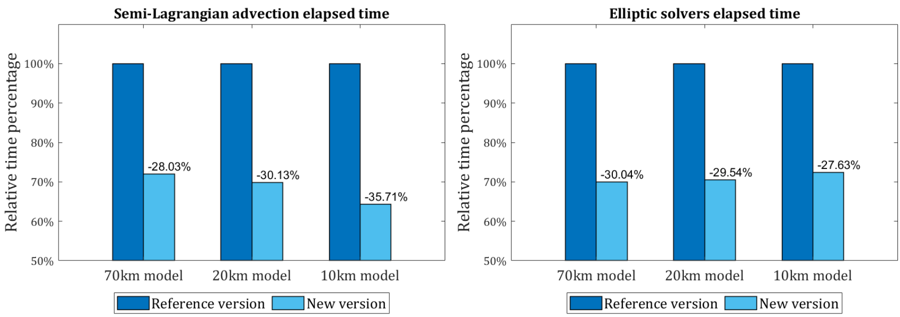

Рис. 6 — Изменение времени расчетов в блоках полулагранжевой адвекции (слева) и решении эллиптических уравнений (справа) для модели ПЛАВ с разрешением 10, 20 и 70 км в результате внедрения одинарной точности.

В рамках второй модификации производится изменение структуры хранения вектора-состояния модели с одного трехмерного массива размерности $(6NLEV + 5, NLON, NJ)$ на набор отдельных массивов, имеющих размеры $(NLEV, NLON, NJ)$, где $NLON$ – количество узлов сетки вдоль долготного направления, $NLEV$ – количество вертикальных уровней и NJ – количество узлов сетки вдоль широтного направления для данного MPI-процесса. Численные эксперименты для версии модели ПЛАВ с разрешением 70 км показали, что внедрение этих изменений позволяет уменьшить время 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, сократилась со 111 до 89 минут. Для модели ПЛАВ с горизонтальным разрешением 10 км при использовании 2916 процессорных ядер наблюдается ускорение выполнения шага по времени на 30%, что приводит к сокращению на 7 минут времени, необходимого для расчета прогноза погоды на 24 часа.

В *разделе 3.4* приведен обзор основных результатов данной Главы.

В **заключении** приведены результаты работы, которые состоят в следующем:

1. Предложен общий подход для построения горизонтальных дискретизаций на редуцированной широтно-долготной сетке на сфере с разнесением переменных типа "C основанный на применении интерполяционного подхода и допускающий построение схем произвольного порядка аппроксимации.
2. Предложен подход для исследования консервативности 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 предложенных дискретизаций реализована численная модель мелкой воды на вращающейся сфере с использованием полунеявного полулагранжевого алгоритма. 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.

Публикации автора по теме диссертации

1. *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.
2. 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.
3. 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.
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. Further development of the parallel program complex of SL-AV atmosphere model / M. Tolstykh [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2017. — С. 290—298.
6. SL-AV model: numerical weather prediction at extra-massively parallel supercomputer / M. Tolstykh [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2018. — С. 379—387.
7. Supercomputing the seasonal weather prediction / R. Fadeev [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2019. — С. 415—426.

8. Implementation of SL-AV Global Atmosphere Model with 10 km Horizontal Resolution / M. Tolstykh [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2020. — С. 216—225.
9. Development of the global multiscale atmosphere model: computational aspects / M. Tolstykh [и др.] // Journal of Physics: Conference Series. Т. 1740. — IOP Publishing. 2021. — С. 012074.
10. Система моделирования атмосферы для бесшовного прогноза / М. Толстых [и др.]. — М.: Триада лтд, 2017.

Гойман Гордей Сергеевич

Масштабируемые полунеявные алгоритмы интегрирования глобальных моделей атмосферной циркуляции

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать ___.___._____. Заказ № ____________
Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.
Типография ____