



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра вычислительных технологий и моделирования

Чаплыгин Андрей Викторович

**Реализация параллельной версии модели циркуляции
океана INMOM**

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Научный руководитель:

д.ф.-м.н.

Н.А. Дианский

Содержание

1	Введение	3
2	Описание модели общей циркуляции океана	5
2.1	Блок расчета динамики	5
2.2	Запись уравнений в сигма-координатах	6
2.3	Решение системы уравнений динамики океана	7
2.4	Граничные условия	9
3	Численная реализация модели	11
3.1	Пространственная аппроксимация	11
3.2	Схема по времени	11
4	Общая схема работы модели	14
5	Реализация параллельной версии модели	19
5.1	Метод декомпозиции области	19
5.2	Режим HCNC	19
5.3	Режим LCHC	20
5.4	Чтение-запись модели	21
6	Тестирование	23
6.1	Платформы	23
6.2	Масштабируемость параллельной версии модели	23
6.3	Тестирование уравнений мелкой воды	27
6.4	Тестирование параллельной версии модели в акватории Черного и Азовского морей	28
7	Выводы	30
8	Список литературы	30

1 Введение

К важнейшим проблемам 21 века относится решение задачи прогноза изменения климата, в значительной мере обусловленное антропогенным воздействием, связанным с выбросами в атмосферу парниковых газов и других загрязняющих веществ, см., например, 3-й [14] и 4-й [15] отчеты IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change).

Согласно определению Всемирной метеорологической организации, климатическую систему Земли образуют взаимодействующие между собой следующие основные подсистемы: атмосфера, океан, суша, криосфера и биота [16]. Основу климатических моделей составляют модели общей циркуляции атмосферы и океана как главных компонентов климатической системы. Создание эффективной модели гидротермодинамики океана важно и для изучения процессов, формирующих циркуляцию морей и океанов, что в свою очередь необходимо для потребностей судоходства, рыболовства, прогноза и т.д. [16].

Интенсивное развитие климатических моделей в настоящее время связано в первую очередь с бурным развитием вычислительной техники. Появление петафлопных и терафлопных компьютеров открыло возможности для построения моделей с высокой разрешающей способностью, которые позволяют включать в процесс моделирования менее масштабные, но не менее важные процессы.

Данная дипломная работа основана на новой версии сигма-модели общей циркуляции океана INMOM (Institute of Numerical Mathematics Ocean Model), разрабатываемой в ИВМ РАН (Институт Вычислительной Математики). Предыдущая версия модели INMOM использовалась в качестве океанического блока климатической модели INMCM (Institute of Numerical Mathematics Climate Model), созданной в ИВМ РАН и участвующей в программе IPCC по прогнозированию изменений климата [17, 18].

Предыдущая версия модели INMOM основана на методе расщепления и линеаризации, использующей предположение малости изменения уровня океана по сравнению с его глубиной, справедливое практически для всей акватории Мирового океана, за исключением мелководий. Предыдущая версия модели была распараллеленна в работе Терехова К.М. [28]. Наиболее полно предыдущая версия модели описана в [2, 19].

В новой версии модели проведены модификации в сравнении с предыдущей версией, приведем некоторые из них:

- Формулирование проблемы циркуляции океана в терминах полной свободной поверхности, без предположения $h \approx H$ при $\zeta \ll H$, где h - эффективная глубина океана, H - невозмущенная глубина океана, ζ - отклонение уровня океана от невозмущенной поверхности.
- Использование тензорной формы для оператора боковой вязкости.
- Использование изопикнической диффузии и вихревого переноса Гента-Маквильямса.
- Использование явной схемы по времени 'Чехарда' (leapfrog) для всех операторов в горизонтальной плоскости и использование неявной схемы Эйлера для оператора вертикальной диффузии и вязкости.

Новая версия сигма-модели общей циркуляции океана также имеет рабочее название INMSOM (Institute of Numerical Mathematics Sigma Ocean Model), выбранное таким

образом, чтобы подчеркивать свое отличие от предыдущей версии модели INMOM и другой модели, разрабатываемой в ИВМ РАН в группе Ибраева, построенной в z - координатах. Модель написана на языке Fortran 90/95.

Цель данной работы - эффективная параллельная реализация новой версии сигма-модели общей циркуляции океана для использования в дальнейшем на массивно-параллельных вычислительных системах как с общей, так и распределенной памятью. Параллельная версия модели должна демонстрировать хорошую масштабируемость при большом количестве используемых процессоров. Как основной инструмент при реализации параллельной версии модели была выбрана технология MPI.

В разделах 2-4 приведено описание новой версии модели; в разделе 5 приведено описание параллельной реализации новой версии модели; в разделе 6 приведены результаты тестирования параллельной версии модели.

За предоставленную подробную документацию по новой версии модели автор выражает искреннюю благодарность сотруднику ИВМ РАН Гусеву А.В.

2 Описание модели общей циркуляции океана

2.1 Блок расчета динамики

Система уравнений крупномасштабной динамики океана в приближениях гидростатики и Буссинеска, радиус Земли положен постоянным - записывается в форме Громеки-Лэмба следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{U}_h}{\partial t} + [\text{rot} \mathbf{U} \times \mathbf{U}]_h + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{k} + \text{grad}_h \left(\frac{\mathbf{U}^2}{2} + \frac{p}{\rho_0} \right) &= F_h(\mathbf{U}) \\
 \frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \text{grad} \theta &= F(\theta) - \frac{\partial R}{\partial z} \\
 \frac{\partial S}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \text{grad} S &= F(S) \\
 \frac{\partial p}{\partial z} &= \rho g \\
 \text{div} \mathbf{U} &= 0 \\
 \rho &= \rho(\theta, S, p)
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{U} = (u, v, w)$ - трехмерный вектор скорости, $[\cdot]_h$ - оператор проекции трехмерного вектора на горизонтальную плоскость, p - давление, ρ_0 - равновесная плотность, ρ - отклонение плотности от некоторого равновесного профиля, g - среднее ускорение свободного падения, $\boldsymbol{\Omega}$ - угловая скорость вращения Земли, θ - потенциальная температура, S - соленость, R - поток проникающей радиации, $F(\mathbf{U})$, $F(\theta)$, $F(S)$ - операторы мелкомасштабной физики (диффузии и вязкости), конкретный вид которых выбирается в зависимости от обстоятельств, \mathbf{k} - базисный вектор, направленный вдоль линии действия силы тяжести.

В произвольной ортогональной системе координат (x, y, z) с метрическими коэффициентами (r_x, r_y, r_z) (коэффициентами Ламе) и с единичными векторами $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$, направленными вдоль соответствующих координат, операторы дифференциальной геометрии записываются следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \text{grad} f &= \frac{\mathbf{i}}{r_x} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\mathbf{j}}{r_y} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\mathbf{k}}{r_z} \frac{\partial f}{\partial z} \\
 \text{div} \mathbf{F} &= \frac{1}{r_x r_y r_z} \left(\frac{\partial}{\partial x} (F_x r_y r_z) + \frac{\partial}{\partial y} (F_y r_z r_x) + \frac{\partial}{\partial z} (F_z r_x r_y) \right) \\
 \text{rot} \mathbf{F} &= \frac{\mathbf{i}}{r_y r_z} \left(\frac{\partial}{\partial y} (F_z r_z) - \frac{\partial}{\partial z} (F_y r_y) \right) + \frac{\mathbf{j}}{r_z r_x} \left(\frac{\partial}{\partial z} (F_x r_x) - \frac{\partial}{\partial x} (F_z r_z) \right) + \\
 &\quad + \frac{\mathbf{k}}{r_x r_y} \left(\frac{\partial}{\partial x} (F_y r_y) - \frac{\partial}{\partial y} (F_x r_x) \right)
 \end{aligned}$$

где f - некоторая скалярная функция, $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ - векторное поле.

В обобщенной сферической системе координат $r_z = 1$, а r_x и r_y могут иметь различный вид. Если положить метрические коэффициенты не зависящими от координаты z (приближение тонкой пленки), то уравнения будут иметь вид:

$$\begin{aligned}
\frac{du}{dt} - \left(l + \frac{1}{r_x r_y} \left(v \frac{\partial r_y}{\partial x} - u \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) \right) v &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{1}{r_x} \frac{\partial p}{\partial x} + \tilde{F}_u \\
\frac{dv}{dt} + \left(l + \frac{1}{r_x r_y} \left(v \frac{\partial r_y}{\partial x} - u \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) \right) u &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{1}{r_y} \frac{\partial p}{\partial y} + \tilde{F}_v \\
\frac{\partial p}{\partial z} &= \rho g \\
\frac{d\theta}{dt} &= F(\theta) - \frac{\partial R}{\partial z} \\
\frac{dS}{dt} &= F(S) \\
\frac{1}{r_x r_y} \left(\frac{\partial u r_y}{\partial x} + \frac{\partial v r_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0 \\
\rho &= \rho(\theta, S, p)
\end{aligned} \tag{2}$$

Здесь $\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \frac{u}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{v}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}$, $l = 2\Omega \sin(\phi)$ - параметр Кориолиса, где ϕ - географическая широта.

Более подробно про запись уравнений гидротермодинамики океана в обобщенных координатах можно посмотреть, например, здесь [2, 19].

2.2 Запись уравнений в сигма-координатах

Введем вертикальную координату $\sigma = \frac{z + \zeta(x, y, t)}{H(x, y) + \zeta(x, y, t)}$, где x и y - обобщенные горизонтальные координаты, z - направленная вниз обычная вертикальная координата по глубине, с началом на невозмущенной поверхности океана, H - глубина океана в состоянии покоя, ζ - отклонение уровня океана от невозмущенной поверхности. На рис.1 схематически изображено распределение σ -уровней по глубине.

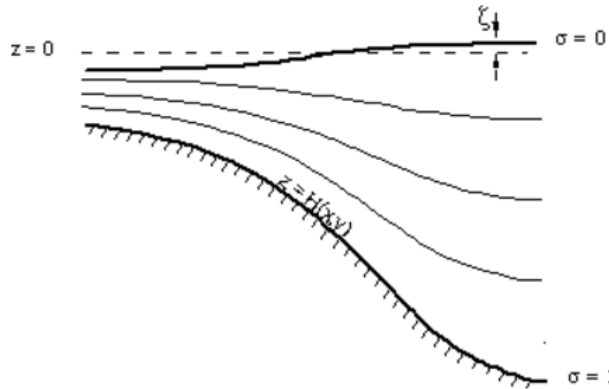


Рис. 1: Схематическое распределение сигма-уровней по глубине

Полагая $h = H + \zeta$ (эффективная глубина океана) и $Z = \sigma h - \zeta$ (геопотенциальная z -координата как функция новых координат), получим изменение частных производных:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{h} \frac{\partial Z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \sigma} \\ \frac{\partial}{\partial y} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial y} - \frac{1}{h} \frac{\partial Z}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \sigma} \\ \frac{\partial}{\partial z} &\rightarrow \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial \sigma} \\ \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{h} \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \sigma}\end{aligned}$$

Тогда система перепишется следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} - \left(l + \frac{1}{r_x r_y} \left(v \frac{\partial r_y}{\partial x} - u \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) \right) v &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{1}{r_x} \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{h} \frac{\partial Z}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial \sigma} \right) + \tilde{F}_u + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa}{h} \left(\frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) \right) \\ \frac{dv}{dt} + \left(l + \frac{1}{r_x r_y} \left(v \frac{\partial r_y}{\partial x} - u \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) \right) u &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{1}{r_y} \left(\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{1}{h} \frac{\partial Z}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial \sigma} \right) + \tilde{F}_v + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa}{h} \left(\frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) \right) \\ \frac{1}{h} \frac{\partial p}{\partial \sigma} &= \rho g \\ \frac{d\theta}{dt} &= F(\theta) + \tilde{F}_\theta - \frac{1}{h} \frac{\partial R}{\partial \sigma} \\ \frac{dS}{dt} &= F(S) + \tilde{F}_S \\ \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r_x r_y} \left(\frac{\partial u r_y h}{\partial x} + \frac{\partial v r_x h}{\partial y} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} &= 0 \\ \rho &= \rho(\theta, S, p)\end{aligned}\tag{3}$$

Здесь $\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \frac{u}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{v}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}$ и $\omega = w - \frac{u}{r_x} \frac{\partial Z}{\partial x} - \frac{v}{r_y} \frac{\partial Z}{\partial y} - \frac{\partial Z}{\partial t}$ - составляющая скорости, нормальная к σ -поверхности.

Вывод уравнений геофизической гидротермодинамики при переходе от координаты обычной глубины z к σ -координате приведен, например, в работах [7, 21].

2.3 Решение системы уравнений динамики океана

- 1. Приведение к дивергентному виду.** Умножим уравнения для горизонтальных скоростей на $h r_x r_y$. Затем к уравнению для u прибавим уравнение неразрывности, умноженное на $u r_x r_y$, а к уравнению для v - уравнение неразрывности, умноженное на $v r_x r_y$.
- 2. Симметризация градиента давления.** Представим давление как $p = \tilde{p} + \frac{1}{2} \rho g Z$.

Тогда исключая уравнение гидростатики, получим:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial r_x r_y h u}{\partial t} + T_u(u, v, \omega, h) - h r_x r_y l v &= P_x - r_y h g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + F_u(u, v) + r_x r_y \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa}{h} \left(\frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) \right) \\
\frac{\partial r_x r_y h v}{\partial t} + T_v(u, v, \omega, h) + h r_x r_y l u &= P_y - r_x h g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + F_v(u, v) + r_x r_y \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa}{h} \left(\frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) \right) \\
\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r_x r_y} \left(\frac{\partial u r_y h}{\partial x} + \frac{\partial v r_x h}{\partial y} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} &= 0 \\
\frac{\partial r_x r_y h \theta}{\partial t} + T_\theta(u, v, \omega, \theta, h) &= F_\theta(\theta) + r_x r_y \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa_\theta}{h} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \sigma} \right) \right) - r_x r_y \frac{\partial R}{\partial \sigma} \\
\frac{\partial r_x r_y h S}{\partial t} + T_S(u, v, \omega, S, h) &= F_S(S) + r_x r_y \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa_S}{h} \left(\frac{\partial S}{\partial \sigma} \right) \right) \\
\rho &= \rho(\theta, S, p)
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь введены следующие обозначения:

1. κ , κ_θ , κ_S - коэффициенты вертикальной турбулентной вязкости (для u и v) и диффузии (для θ и S).

2. Операторы переноса в (4) записаны в дивергентной, симметризованной форме:

$$\begin{aligned}
T_u(u, v, \omega, h) &= \frac{\partial h r_y u u}{\partial x} + \frac{\partial h r_x v u}{\partial y} + \frac{\partial r_x r_y \omega u}{\partial \sigma} - h \left(v \frac{\partial r_y}{\partial x} - u \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) v \\
T_v(u, v, \omega, h) &= \frac{\partial h r_y u v}{\partial x} + \frac{\partial h r_x v v}{\partial y} + \frac{\partial r_x r_y \omega v}{\partial \sigma} + h \left(v \frac{\partial r_y}{\partial x} - u \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) u \\
T_\theta(u, v, \omega, \theta, h) &= \frac{\partial h r_y u \theta}{\partial x} + \frac{\partial h r_x v \theta}{\partial y} + \frac{\partial r_x r_y \omega \theta}{\partial \sigma} \\
T_S(u, v, \omega, S, h) &= \frac{\partial h r_y u S}{\partial x} + \frac{\partial h r_x v S}{\partial y} + \frac{\partial r_x r_y \omega S}{\partial \sigma}
\end{aligned} \tag{5}$$

С вычислительной точки зрения дивергентная форма обладает полезными свойствами: она сохраняет квадратичный интеграл переносимой величины по замкнутой области при условии непротекания на твердых границах и выполнения уравнения неразрывности; она допускает простую конечноразностную аппроксимацию. Преимущества дивергентной формы записи уравнений можно посмотреть здесь [4].

3. Градиенты давления в (4) записаны в форме:

$$\begin{aligned}
P_x &= -\frac{g}{2} r_y h \left(\frac{\partial}{\partial x} \int_0^\sigma h \left(\rho - \sigma \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \right) d\sigma - \sigma \left(\rho \frac{\partial h}{\partial x} - h \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \right) \\
P_y &= -\frac{g}{2} r_x h \left(\frac{\partial}{\partial y} \int_0^\sigma h \left(\rho - \sigma \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \right) d\sigma - \sigma \left(\rho \frac{\partial h}{\partial y} - h \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) \right)
\end{aligned} \tag{6}$$

Одна из трудностей применения σ -моделей динамики океана связана с наличием погрешности аппроксимации горизонтального градиента давления. Из-за погрешности разностной аппроксимации градиентов давления вдоль поверхностей $\sigma = const$ возникают ненулевые скорости и иногда, при ярко выраженной стратификации плотности по

вертикали и при больших градиентах топографии дна, эти фиктивные скорости могут быть значительными. Представление горизонтальных градиентов давления в форме (6) позволяет уменьшить эти погрешности [2].

4. Оператор боковой вязкости в (4) записывается как дивергенция тензора напряжений:

$$\begin{aligned} F_u(u, v) &= \frac{1}{r_y} \frac{\partial}{\partial x} (r_y^2 K D_T h) + \frac{1}{r_x} \frac{\partial}{\partial y} (r_x^2 K D_S h) \\ F_v(u, v) &= -\frac{1}{r_x} \frac{\partial}{\partial y} (r_x^2 K D_T h) + \frac{1}{r_y} \frac{\partial}{\partial x} (r_y^2 K D_S h) \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь K - коэффициент вязкости, а D_T и D_S - компоненты тензоров напряжений сжатия-растяжения и сдвига соответственно:

$$\begin{aligned} D_T &= \frac{r_y}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u}{r_y} \right) - \frac{r_x}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v}{r_x} \right) \\ D_S &= \frac{r_x}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{u}{r_x} \right) + \frac{r_y}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{r_y} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

Операторы диссипации для скоростей написаны в упрощенной форме вдоль сигма-поверхностей [2, 25].

5. Оператор горизонтального турбулентного обмена для температуры и солёности реализован в виде суммы изопикнической диффузии и вихревого переноса Гента-Маквильямса [25-27]:

$$\begin{aligned} D(S) &= \text{div}(\widehat{K} \text{grad} S) \\ \widehat{K} &= \begin{pmatrix} \mu & 0 & -\mu\alpha_x \\ 0 & \mu & -\mu\alpha_y \\ -\mu\alpha_x & -\mu\alpha_y & \mu(\alpha_x^2 + \alpha_y^2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma\mu\beta_x \\ 0 & 0 & \gamma\mu\beta_y \\ -\gamma\beta\alpha_x & -\gamma\beta\alpha_y & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9)$$

где μ - коэффициент боковой диффузии, γ - коэффициент пропорциональности, обычно полагающийся равным 1, $\alpha_x = \frac{\partial \rho_{\text{pot}} / \partial x}{\partial \rho_{\text{pot}} / \partial \sigma}$, $\alpha_y = \frac{\partial \rho_{\text{pot}} / \partial y}{\partial \rho_{\text{pot}} / \partial \sigma}$, $\beta_y = \alpha_y - \frac{Z_y}{h}$. $\beta_x = \alpha_x - \frac{Z_x}{h}$. Первое слагаемое тензора описывает диффузию вдоль поверхностей постоянной потенциальной плотности, второе - процесс переноса со скоростями:

$$U_{gm} = \frac{\partial}{\partial z} (\gamma\mu\beta_x), \quad V_{gm} = \frac{\partial}{\partial z} (\gamma\mu\beta_y), \quad W_{gm} = \text{div}_h (\gamma\mu\beta_x, \gamma\mu\beta_y).$$

2.4 Граничные условия

На твердых участках границы области ставятся следующие условия: для скорости - непротекание, скольжение на боковой поверхности и квадратичное трение на дне; для температуры и солёности - отсутствие потоков вещества. Рассмотрим условия на

открытой границе $\sigma = 0$, которая может содержать источники воды, тепла, соли и импульса. На ней ставятся следующие граничные условия:

- для вертикальной скорости - скорость притока объема воды в бассейн:

$$\omega = Q \quad (10)$$

где Q - баланс воды на поверхности, задаваемый в единицах скорости.

- для импульса:

$$\omega \mathbf{U}_h - \frac{\nu}{h} \frac{\partial \mathbf{U}_h}{\partial \sigma} = q_U \quad (11)$$

где q_U - поток импульса, состоящий как из напряжения трения ветра на поверхности, так и из импульса, изменяемого в системе за счет изменения объема бассейна.

- для температуры и солености:

$$\begin{aligned} \omega \theta - \frac{\nu_\theta}{h} \frac{\partial \theta}{\partial \sigma} &= q_\theta \\ \omega S - \frac{\nu_S}{h} \frac{\partial S}{\partial \sigma} &= q_S \end{aligned} \quad (12)$$

где q_θ и q_S - потоки тепла и соли соответственно, состоящие как из фактических потоков на поверхности, так и из тепла и соли, изменяемых в системе за счет изменения объема бассейна.

3 Численная реализация модели

3.1 Пространственная аппроксимация

В модели используется сетка в общем случае нерегулярная по долготе и широте и неравномерная по вертикали. Разобьем область $x \in [x_0, x_{max}]$, $y \in [y_0, y_{max}]$, куда входит область, на которой рассматривается система уравнений (4), на элементарные ячейки, которые будут иметь форму прямоугольников:

$$\{(x, y, \sigma) : x_{m-1} < x < x_m, \quad y_{n-1} < y < y_n, \quad \sigma_{k-1} < \sigma < \sigma_k\}$$

Для решения системы уравнений (4) применяется техника построения разностных аппроксимаций по пространству второго порядка точности на разнесенной 'C'-сетке по классификации Аракавы [12, 13]. На рис.2 показаны распределения переменных в каждой сеточной ячейке.

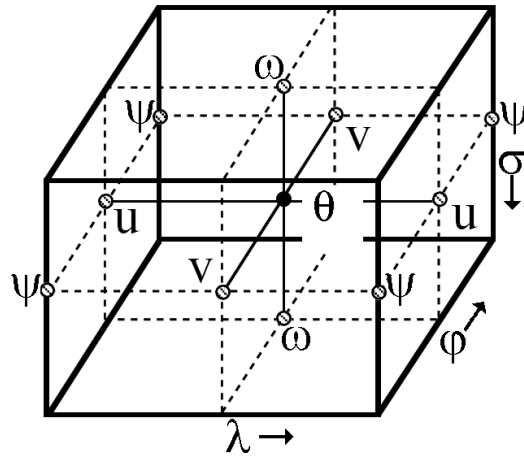


Рис. 2: Распределение переменных на ячейке модельной сетки

Внутри ячейки располагаются скалярные величины $(\theta, S, p, \rho, \zeta)$. В этих же точках задана топография дна и рассчитывается дивергенция скорости. На соответствующих гранях распределяются потоковые переменные, такие как компоненты вектора скорости (u, v, ω) , а также производные скалярных величин по соответствующим направлениям. При этом скорости расположены точно в центре отрезка, соединяющего две соседние точки скалярных величин, что необходимо для получения правильной конечноразностной аппроксимации по пространству [2, 3]. Относительная завихренность определяется в центрах вертикальных ребер ячеек, там же определяется параметр Кориолиса l .

При построении разностных схем особое место уделяется тому, чтобы сохранялись свойства симметрии разностных аналогов операторов, которые выполняются для дифференциальной задачи. Это позволяет автоматически удовлетворять энергетическим соотношениям в разностной задаче, справедливым для дифференциальной. Методика построения пространственных разностных аппроксимаций хорошо изложена, например, здесь [3, 4].

3.2 Схема по времени

В модели используется схема по времени типа 'Чехарда со средней точкой' ('leapfrog'). Для определения решения на шаге $n + 1$ используются решения на шагах n

и $n - 1$:

$$\frac{f^{n+1} - f^{n-1}}{2\tau} = F_1(f^n) + F_2(f^{n-1}) + F_3(f^{n+1}) \quad (13)$$

Слагаемые F_1 , участвующие в законе сохранения энергии, берутся с шага n . Слагаемые F_2 и F_3 , ответственные за диссипацию, берутся с шага $n - 1$ для боковой вязкости и с шага $n + 1$ для вертикальной.

Как известно, у схемы 'Чехарда' по времени есть недостаток: имеется возможность расчленения решения по временным шагам, т.е. когда развиваются два несвязных расчлененных решения, чередующихся на каждом шаге [4]. Для того, чтобы избежать такого эффекта, на каждом временном шаге n в модели делается фильтрация такой схемы [8]:

$$f^s = f^n + \frac{a}{2}(f^{n+1} - 2f^n + f^{n-1}) \quad (14)$$

Затем, при переходе на следующий шаг по времени, решение f^s присваивается f^{n-1} , а решение f^{n+1} присваивается f^n . Параметр для фильтрации часто выбирают $a = 0.05$ [8].

Известно, что система уравнений динамики океана содержит спектр движений с большим диапазоном характерных скоростей: скорости течений и бароклиных гравитационных волн составляют $1 - 3\text{м/с}$; скорости баротропных гравитационных волн составляют $30 - 200\text{м/с}$ ($c = \sqrt{gH}$, $g = 10\text{м/с}^2$, $H \sim 100 - 5000\text{м} \rightarrow c \sim 30 - 200\text{м/с}$ [1]). Поэтому уравнения для основных трехмерных прогностических величин решаются с крупным шагом по времени (DTI, Internal mode), ограниченным условием Куранта по скорости адвекции и бароклиных внутренних волн, а для разрешения быстрых баротропных гравитационных волн решается система уравнений мелкой воды с малым шагом по времени (DTE, External mode), ограниченным скоростью гравитационных волн, от момента $n - 1$ до момента $n + 1$ основной задачи (рис. 3) [8].

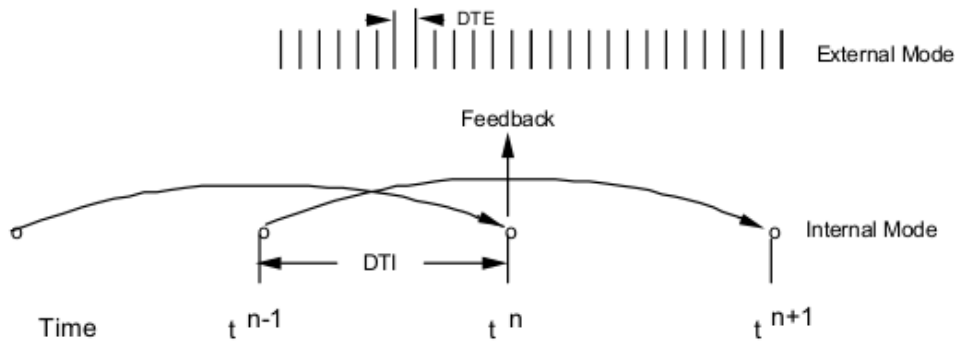


Рис. 3: Схема расчета быстрых баротропных волн

Система для быстрых баротропных волн получается интегрированием по глубине

уравнений движения и неразрывности.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial r_x r_y h \bar{u}}{\partial t} + T_u(\bar{u}, \bar{v}, 0) - F_u(\bar{u}, \bar{v}) - h r_x r_y l \bar{v} + r_y h g \frac{\partial \zeta}{\partial x} = \\
& = \overline{P_x} + \tau_x^{surf} + \tau_x^{bot} - (\overline{T_u(u, v, 0)} - T_u(\bar{u}, \bar{v}, 0)) + (\overline{F_u(u, v)} - F_u(\bar{u}, \bar{v})) \\
& \frac{\partial r_x r_y h \bar{v}}{\partial t} + T_v(\bar{u}, \bar{v}, 0) - F_v(\bar{u}, \bar{v}) + h r_x r_y l \bar{u} + r_x h g \frac{\partial \zeta}{\partial y} = \\
& = \overline{P_y} + \tau_y^{surf} + \tau_y^{bot} - (\overline{T_v(u, v, 0)} - T_v(\bar{u}, \bar{v}, 0)) + (\overline{F_v(u, v)} - F_v(\bar{u}, \bar{v})) \\
& \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r_x r_y} \left(\frac{\partial \bar{u} r_y h}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v} r_x h}{\partial y} \right) = Q
\end{aligned} \tag{15}$$

При интегрировании по глубине получаются интегралы от нелинейных адвективных и диффузионных слагаемых. Чтобы корректно воспроизвести сохранение и преобразование энергии при условии свободной поверхности, в двумерных уравнениях необходимо учитывать адвекцию и диффузию двумерных скоростей. Если вычесть из интегралов по глубине от трехмерных операторов адвекции и диффузии их аналоги от двумерных скоростей, а затем прибавить обратно, то, с учетом условий на поверхности и дне получаем уравнения (15).

В правой части уравнений (15) для скорости находятся слагаемые, отвечающие за неоднородность поля плотности, силы трения на поверхности и дне, а также члены, характеризующие вклад в двумерную циркуляцию нелинейного взаимодействия трехмерных величин. Таким образом, в левой части уравнений расположены слагаемые с переменными, рассчитываемыми на каждом малом шаге по времени. Слагаемые же в правой части уравнений задаются неизменными на всём большом шаге по времени. После того, как расчет быстрых волн на большом шаге завершен, средние за большой шаг характеристики используются для решения трехмерной задачи на большом шаге. Двумерная же задача продолжает на следующем шаге по времени считаться, используя в качестве начальных условий неусредненные величины.

4 Общая схема работы модели

Схему работы модели можно описать следующим образом: инициализация, основной цикл по времени, финализация. Основной цикл по времени состоит из следующих этапов:

1. Определение текущего модельного времени (подпрограмма `model_time_def`):

$$t = t(\tau, n) \quad (16)$$

где t - текущее время, n - номер шага, τ - величина основного шага по времени в секундах.

2. Задание на поверхности и открытых границах данных, соответствующих текущему моменту времени:

$$f_{bound} = f_{bound}(t) \quad (17)$$

где в качестве f_{bound} выступают температура и соленость поверхности океана и данные на открытых границах (для данных на океанической сетке подпрограмма `os_data_time_interpol`) и характеристики атмосферы (для данных на атмосферной сетке интерполяция по времени - подпрограмма `atm_data_time_interpol`, и интерполяция по пространству - подпрограмма `atm_data_spatial_interpol`).

3. Расчет коэффициентов вертикального обмена:

$$Ri = Ri(\rho_{pot}^n, u^n, v^n), \quad \nu = \nu(Ri) \quad (18)$$

где Ri - число Ричардсона, ν - коэффициент вертикальной диссипации, который свой для скорости, температуры и солености (подпрограммы `richnum` и `ppmix`).

4. Расчет компонентов тензора горизонтальных напряжений для полных трехмерных скоростей и средних по глубине (подпрограмма `stress_components`):

$$\begin{aligned} D_T &= \frac{r_y}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^{n-1}}{r_y} \right) - \frac{r_x}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v^{n-1}}{r_x} \right) \\ D_S &= \frac{r_x}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{u^{n-1}}{r_x} \right) + \frac{r_y}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v^{n-1}}{r_y} \right) \\ \overline{D_T} &= \frac{r_y}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\overline{u^{n-1}}}{r_y} \right) - \frac{r_x}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\overline{v^{n-1}}}{r_x} \right) \\ \overline{D_S} &= \frac{r_x}{r_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\overline{u^{n-1}}}{r_x} \right) + \frac{r_y}{r_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\overline{v^{n-1}}}{r_y} \right) \end{aligned} \quad (19)$$

5. Расчет коэффициентов горизонтального турбулентного обмена по Смагоринскому, при этом от вязкости рассчитывается и среднее по глубине:

$$\mu = \mu_{ref} + smag(D_T^2 + D_S^2) \quad (20)$$

где μ_{ref} - фоновое значение коэффициента, $smag$ - функция от модуля тензора напряжений (подпрограмма `smagorinsky_coeff`).

6. Расчет углов наклона для универсальной диффузии (подпрограмма `diffusion_slopes`).
7. Расчет потоков на поверхности (подпрограмма `sea_surface_fluxes`) и дне (подпрограмма `sea_bottom_fluxes`).
8. Расчет адвективных по скоростям с шага n (подпрограмма `uv_trans`) и диффузионных по рассчитанным компонентам тензора напряжений (подпрограммы `uv_diff` и `uv_diff4`) членов для трехмерных скоростей и для средних по глубине:

$$\begin{aligned}
T_u(u^n, v^n) &= \frac{\partial h^n r_y u^n u^n}{\partial x} + \frac{\partial h^n r_x v^n u^n}{\partial y} - h^n \left(v^n \frac{\partial r_y}{\partial x} - u^n \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) v^n \\
T_v(u^n, v^n) &= \frac{\partial h^n r_y u^n v^n}{\partial x} + \frac{\partial h^n r_x v^n v^n}{\partial y} + h^n \left(v^n \frac{\partial r_y}{\partial x} - u^n \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) u^n \\
T_u(\overline{u^n}, \overline{v^n}) &= \frac{\partial h^n r_y \overline{u^n u^n}}{\partial x} + \frac{\partial h^n r_x \overline{v^n u^n}}{\partial y} - h^n \left(\overline{v^n} \frac{\partial r_y}{\partial x} - \overline{u^n} \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) \overline{v^n} \\
T_v(\overline{u^n}, \overline{v^n}) &= \frac{\partial h^n r_y \overline{u^n v^n}}{\partial x} + \frac{\partial h^n r_x \overline{v^n v^n}}{\partial y} + h^n \left(\overline{v^n} \frac{\partial r_y}{\partial x} - \overline{u^n} \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) \overline{u^n}
\end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}
F_u(u^{n-1}, v^{n-1}) &= \frac{1}{r_y} \frac{\partial}{\partial x} (r_y^2 K D_T h) + \frac{1}{r_x} \frac{\partial}{\partial y} (r_x^2 K D_S h) \\
F_v(u^{n-1}, v^{n-1}) &= -\frac{1}{r_x} \frac{\partial}{\partial y} (r_x^2 K D_T h) + \frac{1}{r_y} \frac{\partial}{\partial x} (r_y^2 K D_S h) \\
F_u(\overline{u^{n-1}}, \overline{v^{n-1}}) &= \frac{1}{r_y} \frac{\partial}{\partial x} (r_y^2 \overline{K D_T h}) + \frac{1}{r_x} \frac{\partial}{\partial y} (r_x^2 \overline{K D_S h}) \\
F_v(\overline{u^{n-1}}, \overline{v^{n-1}}) &= -\frac{1}{r_x} \frac{\partial}{\partial y} (r_x^2 \overline{K D_T h}) + \frac{1}{r_y} \frac{\partial}{\partial x} (r_y^2 \overline{K D_S h})
\end{aligned} \tag{22}$$

Оператор боковой бигармонической вязкости и диффузии получается двукратным применением оператора гармонической.

9. Расчет градиентов давления по плотности с шага n для трехмерных скоростей (подпрограмма `pressure_gradients`):

$$\begin{aligned}
P_x &= -\frac{g}{2} r_y h^n \left(\frac{\partial}{\partial x} \int_0^\sigma h^n \left(\rho^n - \sigma \frac{\partial \rho^n}{\partial \sigma} \right) d\sigma - \sigma \left(\rho^n \frac{\partial h^n}{\partial x} - h^n \frac{\partial \rho^n}{\partial x} \right) \right) \\
P_y &= -\frac{g}{2} r_x h^n \left(\frac{\partial}{\partial y} \int_0^\sigma h^n \left(\rho^n - \sigma \frac{\partial \rho^n}{\partial \sigma} \right) d\sigma - \sigma \left(\rho^n \frac{\partial h^n}{\partial y} - h^n \frac{\partial \rho^n}{\partial y} \right) \right)
\end{aligned} \tag{23}$$

10. Расчет правых частей для двумерных скоростей: дисперсионные члены адвекции-диффузии, напряжение трения на поверхности и дне, градиенты гидростатиче-

ского давления, включая атмосферное.

$$\begin{aligned}
RHS_{\bar{U}} &= \bar{P}_x - p_x^{atm} + \tau_x^{surf} + \tau_x^{bot} - (\overline{T_u(u^n, v^n)} - T_u(\bar{u}^n, \bar{v}^n)) + (\overline{F_u(u^n, v^n)} - F_u(\bar{u}^n, \bar{v}^n)) \\
RHS_{\bar{V}} &= \bar{P}_y - p_y^{atm} + \tau_y^{surf} + \tau_y^{bot} - (\overline{T_v(u^n, v^n)} - T_v(\bar{u}^n, \bar{v}^n)) + (\overline{F_v(u^n, v^n)} - F_v(\bar{u}^n, \bar{v}^n))
\end{aligned} \tag{24}$$

11. Решение задачи для быстрых баротропных волн (подпрограмма `barotropic_dynamics`).

На этом этапе решаются нелинейные уравнения мелкой воды на интервале (t^{n-1}, t^{n+1}) путем разбиения этого интервала на $2N$ частей.

а) Расчет быстрого уровня по уравнению неразрывности:

$$r_x r_y \frac{h_{ext}^{p+1} - h_{ext}^{p-1}}{2\tau_{inner}} + \frac{\partial \bar{u}_{ext}^p r_y h_{ext}^p}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}_{ext}^p r_x h_{ext}^p}{\partial y} = Q \tag{25}$$

б) Расчет быстрых скоростей. Адвекция и диффузия рассчитываются на каждом малом шаге по времени:

$$\begin{aligned}
& r_x r_y \frac{h_{ext}^{p+1} \bar{u}_{ext}^{p+1} - h_{ext}^{p-1} \bar{u}_{ext}^{p-1}}{2\tau_{inner}} + T_u(\bar{u}_{ext}^p, \bar{v}_{ext}^p) - F_u(\bar{u}_{ext}^{p-1}, \bar{v}_{ext}^{p-1}) - \\
& - h_{ext}^p r_x r_y l \bar{v}_{ext}^p + r_y h_{ext}^p g \frac{\partial \zeta_{ext}^p}{\partial x} = RHS_{\bar{U}} \\
& r_x r_y \frac{h_{ext}^{p+1} \bar{v}_{ext}^{p+1} - h_{ext}^{p-1} \bar{v}_{ext}^{p-1}}{2\tau_{inner}} + T_v(\bar{u}_{ext}^p, \bar{v}_{ext}^p) - F_v(\bar{u}_{ext}^{p-1}, \bar{v}_{ext}^{p-1}) + \\
& + h_{ext}^p r_x r_y l \bar{u}_{ext}^p + r_x h_{ext}^p g \frac{\partial \zeta_{ext}^p}{\partial y} = RHS_{\bar{V}}
\end{aligned} \tag{26}$$

Здесь $\tau_{inner} = \tau/N$, $(\bar{u}_{ext}, \bar{v}_{ext}, \zeta_{ext})$ - переменные задачи для быстрых волн, p - номер внутреннего шага по времени, $p = 1, \dots, 2N$.

в) Усреднение за большой шаг по времени быстрых скоростей и градиентов быстрого уровня. На выходе получаются медленные двумерные скорости и градиенты медленного уровня:

$$\begin{aligned}
\bar{u}_{int}^n h^n &= \frac{1}{2N} \sum_{p=1}^{2N} \frac{\bar{u}_{ext}^p h_{ext}^p + \bar{u}_{ext}^{p-1} h_{ext}^{p-1}}{2}, \quad \bar{v}_{int}^n h^n = \frac{1}{2N} \sum_{p=1}^{2N} \frac{\bar{v}_{ext}^p h_{ext}^p + \bar{v}_{ext}^{p-1} h_{ext}^{p-1}}{2} \\
\zeta_{xint}^n &= \frac{1}{2N} r_y g \sum_{p=1}^{2N} \frac{1}{2} \left(h_{ext}^p \frac{\partial \zeta_{ext}^p}{\partial x} + h_{ext}^{p-1} \frac{\partial \zeta_{ext}^{p-1}}{\partial x} \right) \\
\zeta_{yint}^n &= \frac{1}{2N} r_x g \sum_{p=1}^{2N} \frac{1}{2} \left(h_{ext}^p \frac{\partial \zeta_{ext}^p}{\partial y} + h_{ext}^{p-1} \frac{\partial \zeta_{ext}^{p-1}}{\partial y} \right)
\end{aligned} \tag{27}$$

12. Расчет медленного уровня по уравнению неразрывности с использованием медленных двумерных скоростей (подпрограмма ssh_internal):

$$r_x r_y \frac{h^{n+1} - h^{n-1}}{2\tau} + \frac{\partial \bar{u}_{int}^n r_y h^n}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}_{int}^n r_x h^n}{\partial y} = Q \quad (28)$$

13. Удаление из скоростей на шаге n баротропных составляющих. Расчет вертикальной скорости (подпрограмма vertical_velocity):

$$\begin{aligned} u_{bcl}^n &= u^n - \int_0^1 u^n d\sigma, \quad v_{bcl}^n = v^n - \int_0^1 v^n d\sigma \\ \omega^n &= \int_1^\sigma \frac{1}{r_x r_y} \left(\frac{\partial u_{bcl}^n r_y h^n}{\partial x} + \frac{\partial v_{bcl}^n r_x h^n}{\partial y} + Q \right) d\sigma \end{aligned} \quad (29)$$

14. Добавление в скорости на шаге n новых медленных двумерных скоростей:

$$u_{new}^n = u_{bcl}^n + \bar{u}_{int}^n, \quad v_{new}^n = v_{bcl}^n + \bar{v}_{int}^n \quad (30)$$

15. Расчет адвективной правой части по скорректированным скоростям на шаге n :

$$\begin{aligned} T_u(u_{new}^n, v_{new}^n) &= \frac{\partial h^n r_y u_{new}^n u_{new}^n}{\partial x} + \frac{\partial h^n r_x v_{new}^n u_{new}^n}{\partial y} - h^n \left(v_{new}^n \frac{\partial r_y}{\partial x} - u_{new}^n \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) v_{new}^n \\ T_v(u_{new}^n, v_{new}^n) &= \frac{\partial h^n r_y u_{new}^n v_{new}^n}{\partial x} + \frac{\partial h^n r_x v_{new}^n v_{new}^n}{\partial y} + h^n \left(v_{new}^n \frac{\partial r_y}{\partial x} - u_{new}^n \frac{\partial r_x}{\partial y} \right) u_{new}^n \end{aligned} \quad (31)$$

16. Расчет правой части для трехмерных уравнений: диффузионная, скорректированная адвективная, градиенты давления, включая атмосферное и градиенты медленного уровня из задачи для быстрых баротропных волн.

$$RHS_U = P_x - p_x^{atm} - T_u(u_{new}^n, v_{new}^n) + F_u(u^{n-1}, v^{n-1}) - \zeta_{xint}^n \quad (32)$$

$$RHS_V = P_y - p_y^{atm} - T_v(u_{new}^n, v_{new}^n) + F_v(u^{n-1}, v^{n-1}) - \zeta_{yint}^n$$

17. Расчет температуры и солёности (подпрограмма tracer_tran_diff):

$$r_x r_y \frac{h^{n+1} \theta^{n+1} - h^{n-1} \theta^{n-1}}{2\tau} + T(u^n, v^n, \omega^n, \theta^n, h^n) = D(\mu, \nu, \alpha_x, \alpha_y, \theta^{n-1}, \theta^{n+1}) - \frac{\partial R}{\partial \sigma} \quad (33)$$

Здесь θ - потенциальная температура, T - оператор переноса скаляра как функция скоростей, скаляра и глубины, D - совокупность операторов боковой и вертикальной диффузии как функция коэффициентов, углов наклона изонейтральных поверхностей и искомого скаляра, R - вертикальный поток проникающей радиации. Аналогичное уравнение для солёности, за исключением источника радиации.

18. Расчет новых трехмерных скоростей на шаге $n + 1$ (подпрограмма `baroclinic_dynamics`):

$$\begin{aligned}
r_x r_y \frac{h^{n+1} u^{n+1} - h^{n-1} u^{n-1}}{2\tau} - h r_x r_y l v &= RHS_U + r_x r_y \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa}{h^{n+1}} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial \sigma} \right) - \omega^n u^n \right) \\
r_x r_y \frac{h^{n+1} v^{n+1} - h^{n-1} v^{n-1}}{2\tau} + h r_x r_y l u &= RHS_V + r_x r_y \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\kappa}{h^{n+1}} \left(\frac{\partial v^{n+1}}{\partial \sigma} \right) - \omega^n v^n \right)
\end{aligned}
\tag{34}$$

5 Реализация параллельной версии модели

5.1 Метод декомпозиции области

При реализации параллельной версии модели используется метод декомпозиции области. Суть его в следующем: расчетная область разбивается на подобласти, которые ставятся в соответствие каждому процессору. Процессор проводит вычисления только на своей подобласти и если ему понадобятся данные с соседней подобласти, то осуществляется обмен данными между процессорами. Разбиение области на подобласти происходит только в горизонтальной плоскости, игнорируя вертикальную (см рис.4). Причин этому несколько: во-первых, вертикальное направление плохо поддается распараллеливанию в связи с тем, что присутствует неявная численная схема в этом направлении, и во-вторых, слой океана имеет небольшую толщину по сравнению с горизонтальными масштабами и поэтому вертикальное измерение можно игнорировать при реализации параллельной версии. Кроме того такое разбиение удобно тем, что по вертикали в сигма-модели используется всегда одно и то же количество расчетных уровней.

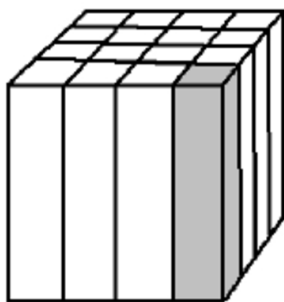


Рис. 4: Метод декомпозиции области в горизонтальной плоскости

В качестве основного средства распараллеливания используется технология MPI. Так же возможно использование гибридного подхода MPI + OpenMP. В этом случае происходит декомпозиция области и на каждой подобласти используется технология распараллеливания OpenMP, обмен данными между процессорами происходит с помощью технологии MPI.

Реализованы два режима параллельной версии модели: режим HCNC (High-Communication No-Extra Computation), который использует большое количество пересылок между процессорами, но не использует лишние вычисления и режим LCNC (Low-Communication High-Extra Computation), который уменьшает количество пересылок в блоке расчета быстрых баротропных волн за счет увеличения внерасчетной области и лишних вычислений [9]. Более детально об этих режимах будет рассказано далее.

5.2 Режим HCNC

В данном режиме для каждой подобласти добавляется внерасчетная граница толщиной в одну узловую точку. В начале каждого расчета происходит синхронизация между процессорами для обновления значений на внерасчетных границах. При синхронизации пограничные блоки процессора помещаются во внерасчетные границы своих соседних процессоров (рис.5). Когда процессор в своих вычислениях подходит к границе своей

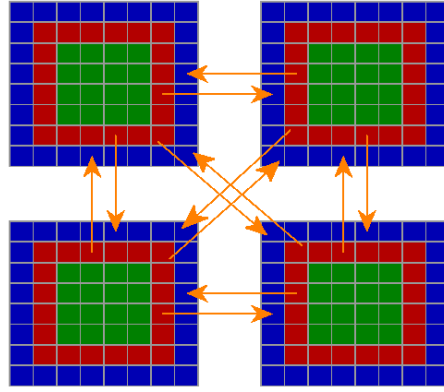


Рис. 5: Синхронизация процессоров. Красные точки - это пограничные блоки подобласти, синие - внерасчетная граница

подобласти и ему требуются данные с соседней подобласти - он берет эти данные со своей внерасчетной границы и продолжает вычисления.

На одномерной по пространству сетке этот режим изображен на рис.6. По вертикали отсчитываются шаги по времени, по горизонтали расположены расчетные узлы. На рисунке изображены 5 шагов алгоритма для одной из подобластей. Белые узлы - это расчетные узлы подобласти, красные узлы - узлы ее внерасчетной границы, синим обведены внерасчетные узлы, которые требуют обновления своих значений на текущем временном шаге.

Видно, что на каждом шаге по времени обновляется внерасчетная граница подобласти, т.е. происходит синхронизация между процессорами.

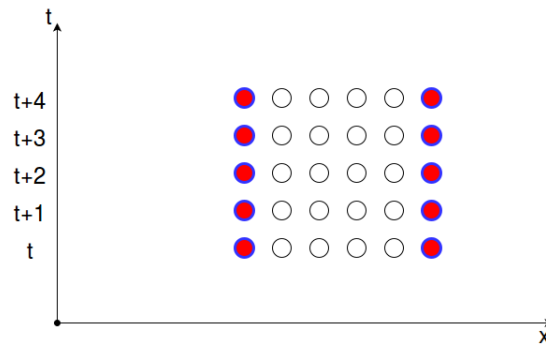


Рис. 6: Механизм работы режима HCNC на одномерной по пространству сетке

Этот режим называют HCNC (High-Communication No-Extra Computation), т.к. он требует большое количество синхронизаций и не использует лишние вычисления.

5.3 Режим LCNC

Очевидный недостаток режима HCNC в том, что используется большое количество синхронизаций между процессорами (на каждом шаге по времени требуется синхронизация), что при увеличении процессоров влечет за собой рост коммуникационных задержек и, следовательно, ухудшение масштабируемости модели.

Особенно это критично для блока расчета быстрых баротропных волн, в котором используется свой внутренний малый шаг по времени и, как следствие, в этом блоке

происходит наибольшее количество синхронизаций. Возникает идея уменьшить количество синхронизаций в блоке расчета быстрых баротропных волн путем расширения внерасчетной границы области.

Этот подход хорошо иллюстрируется на одномерной по пространству сетке с толщиной внерасчетной границы в четыре узловые точки (рис.7). Обозначения на рисунке те же, что и на рис.6.

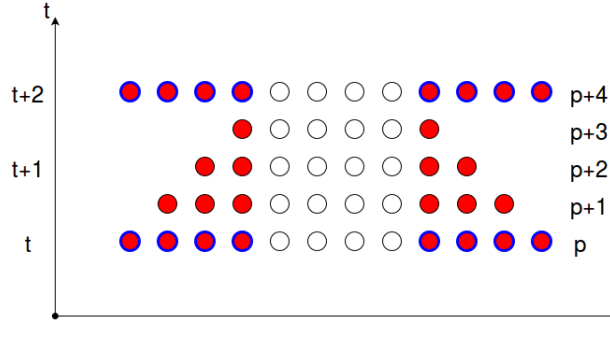


Рис. 7: Механизм работы режима LCNC на одномерной по пространству сетке

В начале расчета происходит синхронизация внерасчетных границ процессоров, т.е. у каждого процессора появляется по четыре значения с соседних подобластей. Затем, на шаге p происходят вычисления уровня, адвекции и диффузии. На шаге $p+1$ происходит вычисление двумерных скоростей и переход на следующий шаг по времени. Далее опять, на шаге $p+2$ - расчет уровня, адвекции и диффузии, на шаге $p+3$ - вычисление двумерных скоростей и переход на следующий шаг по времени. Как можно заметить, во время шагов $p+1$, $p+2$, $p+3$ не происходит синхронизации между процессорами. Происходит одна большая по объему синхронизация в начале расчета и далее процессоры проводят вычисления на своей подобласти с расширенной внерасчетной границей, т.е. происходят лишние вычисления в сравнении с режимом HCNC. Этот режим называют LCNC (Low-Communication High-Extra Computation), т.к. он уменьшает количество синхронизаций, но при этом делает лишние вычисления. Если для расчета быстрых баротропных волн с количеством внутренних шагов $nstep$ режим модели HCNC требует N синхронизаций, то режим LCNC с размером внерасчетной границы $bndlen$ требует $2N/bndlen$ синхронизаций. Несмотря на то, что при межпроцессорном обмене объем пересылаемой информации увеличивается в $bndlen$ раз, пересылка 1 раз $2bndlen$ чисел значительно экономнее, чем $bndlen/2$ раз по два числа (при условии $bndlen \geq 4$).

Похожий способ параллельного расчета уравнений мелкой воды был также предложен в модели Ибраева Р.А. [5, 22] и в работах по распараллеливанию модели POM (Princeton Ocean Model) [9].

5.4 Чтение-запись модели

Модель циркуляции океана использует часто процедуры чтения-записи: при чтении данных из файлов (начальные данные, атмосферные данные, данные с океанической сетки) и регулярной записи результатов расчетов. Поэтому чтение-запись в модели имеет важное место при распараллеливании. Процедуры чтения-записи в модели реализованы средствами MPI-IO [11], с помощью которых процессоры могут производить чтение-запись файлов параллельно и асинхронно, что позволяет каждому процессору

продолжать работу после чтения-записи своего блока данных, не дожидаясь остальных процессоров. Это эффективнее чем, например, производить чтение данных одним процессором и рассылать всем остальным (аналогично при записи данных в файл).

Такой же подход использовался в работе по распараллеливанию предыдущей версии модели [28].

6 Тестирование

6.1 Платформы

Тестирование модели проводилось на кластере ИВМ РАН. Кластер состоит из головного узла, вспомогательного узла и вычислительных узлов, объединенных в разные группы[20]:

Характеристики вычислительных узлов в группе хбcore:

- Compute Node Asus RS704D-E6.
- 12 ядер (два 6-ядерных процессора Intel Xeon X5650@2.67ГГц).
- Оперативная память: 24 Гб.
- Дисковая память: 280 Гб.
- Операционная система: SUSE Linux Enterprise Server 11 SP1 (x86_64).

Тестирование проводилось преимущественно на группе вычислительных узлов хбcore. На кластере установлены последние версии компиляторов Intel Fortran (ifort) и библиотек MPI, с помощью которых собиралась и тестировалась модель.

6.2 Масштабируемость параллельной версии модели

Были проведены расчеты параллельной версии новой сигма-модели циркуляции океана в акватории Черного и Азовского морей с разрешением 4km и с 20 сигма уровнями по вертикали (сетка $289 \times 163 \times 20$). Основной шаг по времени 480 секунд, малый шаг для расчета быстрых баротропных волн 4.8 секунды. Расчет проводился на 15 дней. Масштабируемость параллельной версии в режиме HCNC продемонстрирована на рис.8.

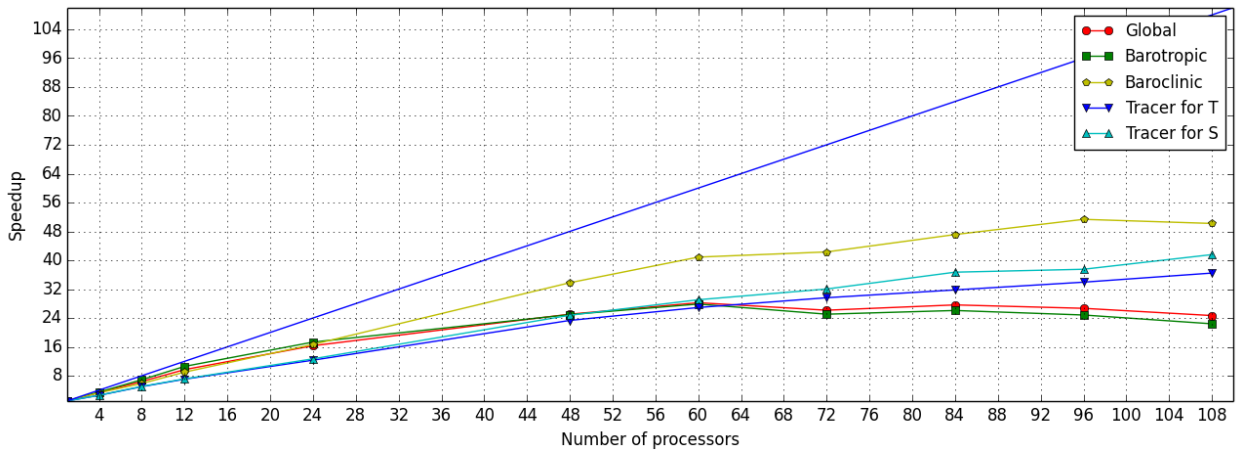


Рис. 8: Масштабируемость режима HCNC модели

На рисунке введены обозначения: Global - это общее время расчета модели; Barotropic - время расчета блока быстрых баротропных волн (подпрограмма barotropic_dynamics); Baroclinic - время расчета блока трехмерных скоростей (подпрограмма baroclinic_dynamics); Tracer_for_T и Tracer_for_S - время расчета блока расчета температуры и солёности в модели соответственно (подпрограмма tracer_tran_diff). По оси y показано ускорение (speedup), вычисленное по формуле $speedup(p) = T_{init}/T_p$,

где T_{init} - время работы модели на начальном количестве процессоров (на данном рисунке $T_{init} = 1$, т.е. время работы не параллельной версии модели), T_p - время работы модели на p процессорах.

Как видно из графика (рис.8), для блока расчета быстрых баротропных волн происходит падение ускорения при увеличении числа процессоров (начиная с 60) в режиме HCNC. Как было сказано ранее, это связано с тем, что расчет быстрых баротропных волн в модели требует большое количество синхронизаций, которые влекут за собой увеличение коммуникационных задержек с ростом числа процессоров. Причем это место в модели критическое, т.к. этот блок занимает существенную часть всего времени расчета и от него зависит масштабируемость всей модели, что видно и из рис.8. Чтобы улучшить масштабируемость блока расчета быстрых баротропных волн, был реализован режим LCHC, описанный ранее. Результаты сравнения расчетов в режиме LCHC и размером вычислительной области в 10 точек с режимом HCNC представлены на рис.9.

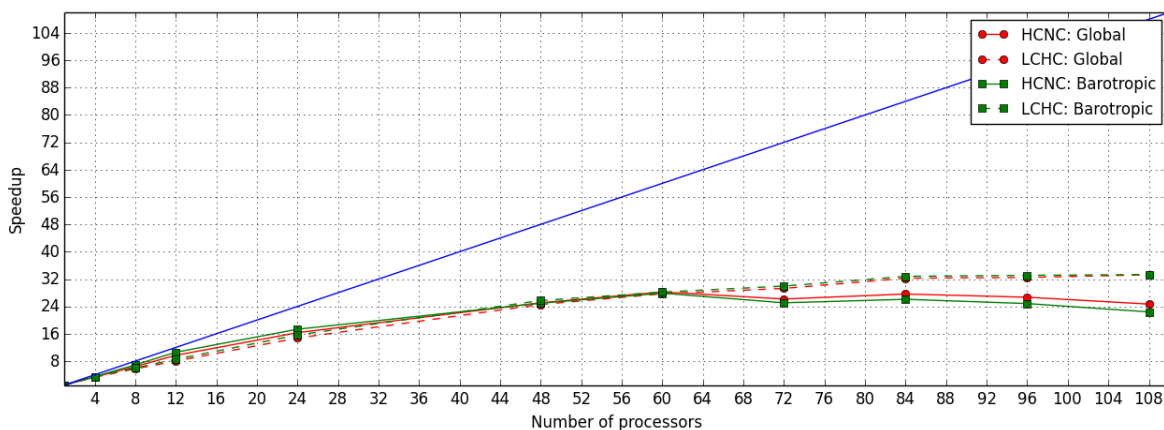


Рис. 9: Масштабируемость режимов HCNC и LCHC

Из рис.9 видно, что в начале, когда число процессоров сравнительно не велико, режим HCNC дает лучше результаты чем LCHC. Это можно объяснить тем, что время синхронизаций на небольшом количестве процессоров не занимает существенно много времени и поэтому режим LCHC работает хуже в силу затраты времени на лишние вычисления по сравнению с HCNC. Когда же число процессоров увеличивается, время синхронизаций играет уже большую роль и режим LCHC проявляет себя лучше.

На рис.10 представлены результаты расчетов в режимах HCNC и LCHC на сетке $600 \times 350 \times 20$, с основным шагом по времени 120 секунд и малым шагом для расчета быстрых баротропных волн 1.2 секунды, расчет на 10 дней. Размер вычислительной области для режима LCHC равен 10 точкам. На данном рисунке $T_{init} = 4$, т.е. отчет ускорения происходит от параллельной версии модели на 4 процессорах. Все сказанное выше для графика на рис.9 остается справедливым и для графика на рис.10.

Так же проводились расчеты в гибридном режиме MPI + OpenMP для задачи с сеткой $289 \times 163 \times 20$ и с основным шагом по времени 480 секунд, малым шагом для расчета быстрых баротропных волн 4.8 секунды, расчет на 15 дней. Распараллеливание по узлам происходит с помощью технологии MPI (за основу взят режим HCNC), распараллеливание внутри узла происходит с помощью технологии OpenMP. На каждом узле используются по 12 ядер. График масштабируемости гибридного режима приведен на рис.11.

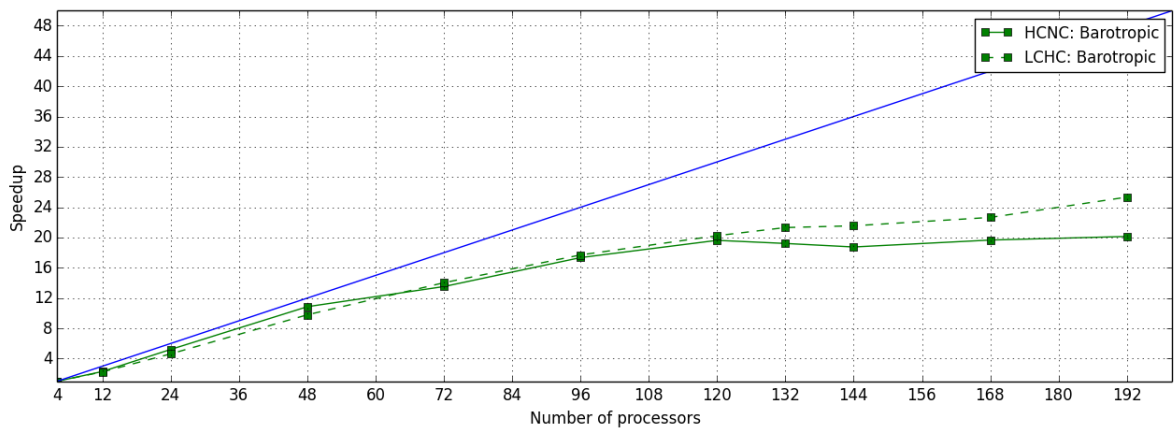


Рис. 10: Масштабируемость режимов HCNC и LCHC на сетке $600 \times 350 \times 20$

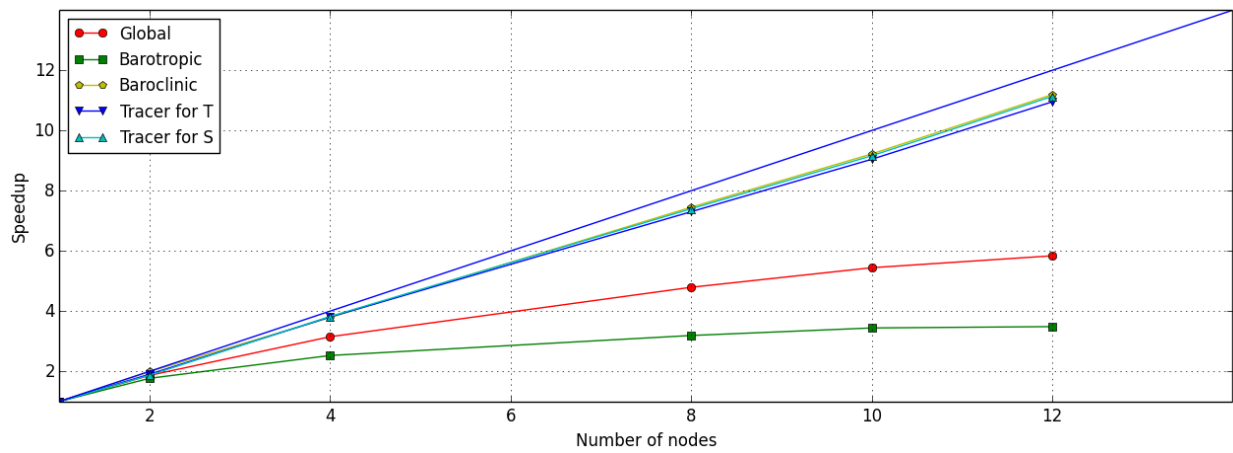


Рис. 11: Масштабируемость гибридного режима, на каждом узле происходит распараллеливание с помощью OpenMP на 12 ядер

На рис.12 показано время расчета (Elapsed time) гибридного режима в сравнении с чистым MPI, на рис.13 представлено сравнение их масштабируемости.

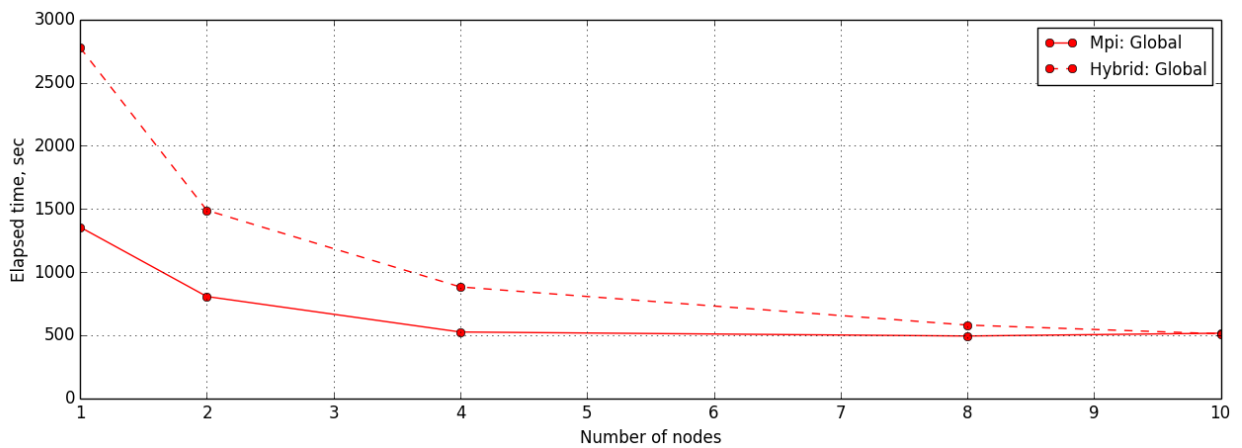


Рис. 12: Время расчета гибридного режима в сравнении с чистым MPI (HCNC режим)

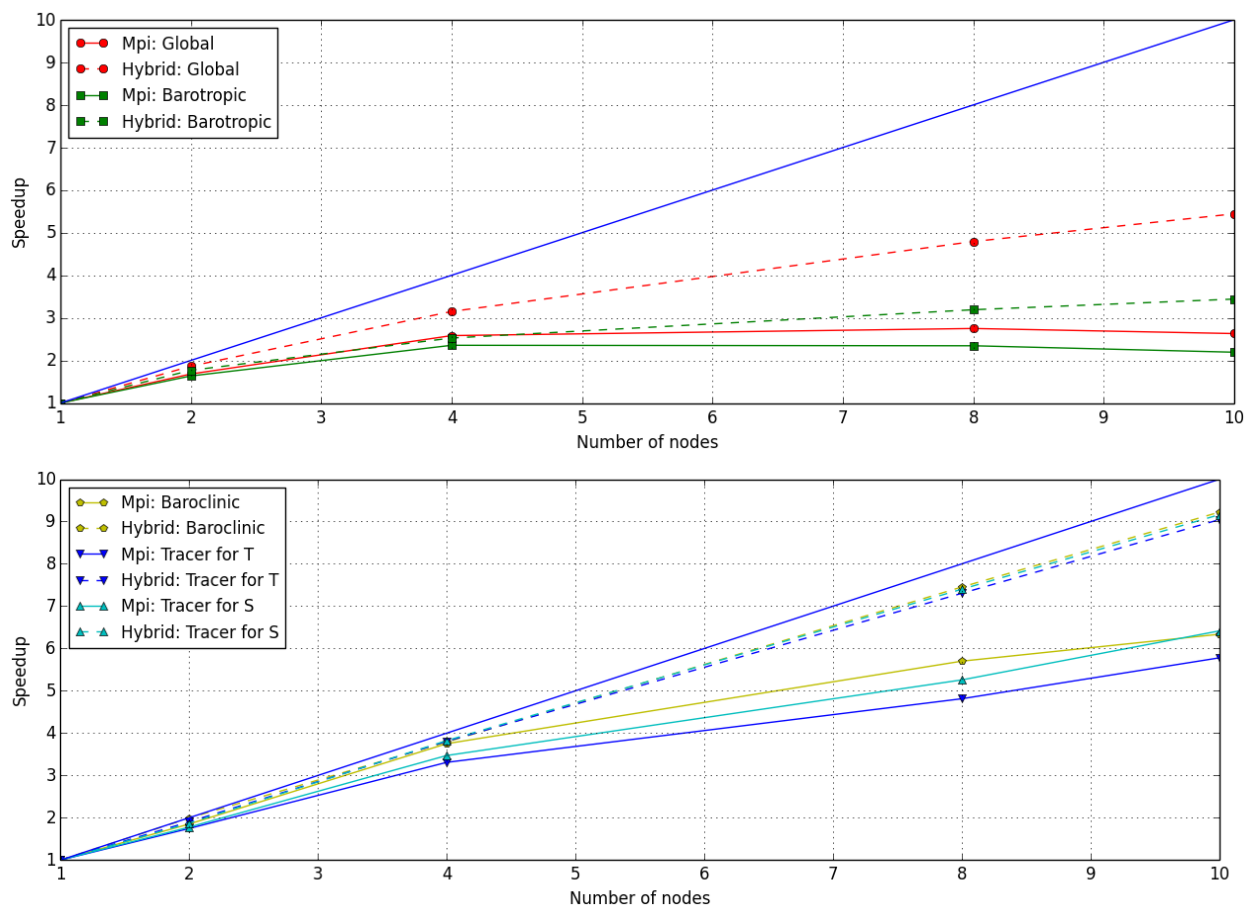


Рис. 13: Масштабируемость гибридного режима и чистого MPI (HCNC режим)

Из рис.11 и рис.13 видно, что гибридный режим позволяет повысить ускорение блоков расчета трехмерных скоростей и расчета температуры и солёности до почти линейной. Также ускорение блока расчета быстрых баротропных волн в гибридном режиме выше по сравнению с режимом HCNC, как и ускорение работы всей модели. Это можно объяснить тем, что при увеличении числа узлов в чистом MPI режиме размер подобласти уменьшается значительно быстрее чем в гибридном режиме, а следовательно растёт количество синхронизаций и время коммуникационных задержек. На рис.12 видно, что на одном узле чистый MPI режим работает быстрее, но из-за лучшей масштабируемости гибридного режима уже на 10 узлах гибридный режим работает быстрее. Про эффективность гибридного режима по сравнению с чистым MPI применительно к модели РОМ можно посмотреть также здесь [23].

6.3 Тестирование уравнений мелкой воды

Нелинейные уравнения мелкой воды на сфере можно записать в такой форме:

$$\begin{aligned}\frac{\partial h\mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}h\mathbf{v}) &= -f\mathbf{k} \times h\mathbf{v} - gh\nabla\zeta \\ \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h\mathbf{v}) &= 0\end{aligned}\tag{35}$$

где h - глубина, ζ - отклонение от свободной поверхности, \mathbf{v} - вектор двумерной скорости, g - ускорение свободного падения, f - параметр Кориолиса, \mathbf{k} - базисный вектор, направленный вдоль линии действия силы тяжести.

В блоке расчета быстрых баротропных волн модели, решаются именно такие уравнения, только помимо адвекции еще учитывается и диффузия. Для системы (35) существуют стандартные тесты [10] и на этих тестах можно проверить как работает блок расчета быстрых баротропных волн модели на сфере без учета диффузии.

Проводилось отдельное тестирование параллельной версии блока расчета быстрых баротропных волн модели на стандартном тесте 2 с параметром $\alpha = 0$ [10]. В тесте представлено аналитическое стационарное решение нелинейных уравнений мелкой воды (35) на сфере с начальным распределением поля скоростей:

$$\begin{aligned}u &= u_0(\cos\theta) \\ v &= 0\end{aligned}$$

где θ - это широта, λ - долгота, $u_0 = 2\pi R/(12days)$, R - радиус Земли.

И начальным уровнем:

$$\zeta = -(R\Omega u_0 + \frac{u_0^2}{2})(\sin\theta)$$

где Ω - параметр Кориолиса.

Данные значения скоростей и уровня должны оставаться неизменными на протяжении всего времени. Поэтому можно провести расчет на несколько дней и сверится с аналитическим решением, насколько численное решение отклонилось от него.

На рис.14 представлены ошибки, т.е. разница между аналитическим и численным решением параллельной версии, на 5 день расчета на сетках с разрешением $1.25^\circ \times 1.0^\circ$ и $2.5^\circ \times 2.0^\circ$ соответственно. Если вычислить норму ошибки для уровня:

$$l_\infty(h) = \max(h - h_T) / \max(h_T)$$

где h - рассчитанный уровень и h_T - аналитическое решение, то получим, что для сетки с разрешением $1.25^\circ \times 1.0^\circ$ ошибка равна $l_\infty = 1.74E - 06$ и для сетки с разрешением $2.5^\circ \times 2.0^\circ$ ошибка $l_\infty = 6.93E - 06$. Видно, что при увеличении разрешения сетки в два раза, ошибка уменьшается примерно в четыре раза, т.е. нелинейные уравнения мелкой воды (35) в модели решаются со вторым порядком точности по пространству.

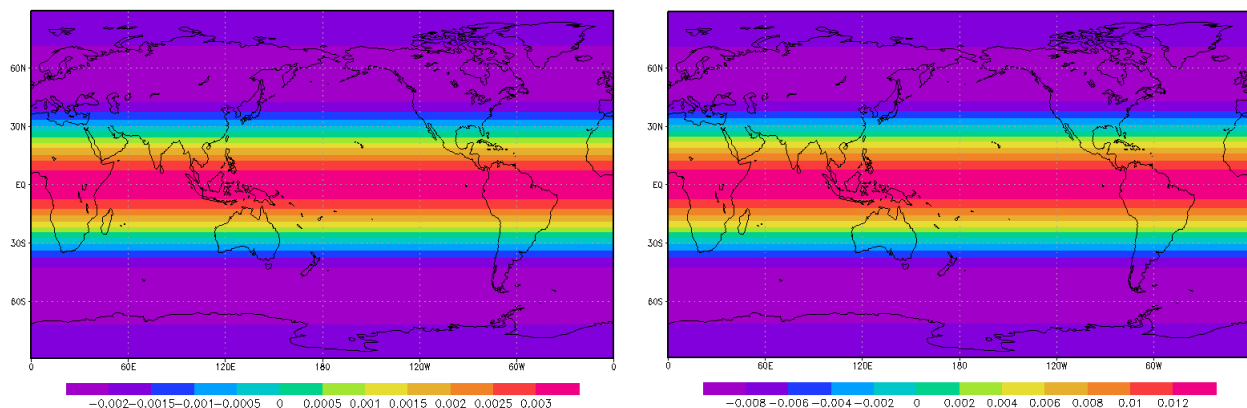


Рис. 14: Ошибка уровня (в метрах) на 5 день расчета на сетках $1.25^\circ \times 1.0^\circ$ и $2.5^\circ \times 2.0^\circ$ соответственно

6.4 Тестирование параллельной версии модели в акватории Черного и Азовского морей

Проводился годовой расчет параллельной версии модели в акватории Черного и Азовского морей, результаты представлены на рис.15. Начальный год расчета 2007. Сетка с разрешением 4km, 20 сигма уровней по вертикали, основной шаг по времени 480 секунд и малый шаг для расчета быстрых баротропных волн 4.8 секунд. Атмосферные данные взяты из ERA-Interim [24]. Расчет проводился на 48 процессорах в режиме HCNC на кластере ИВМ РАН.

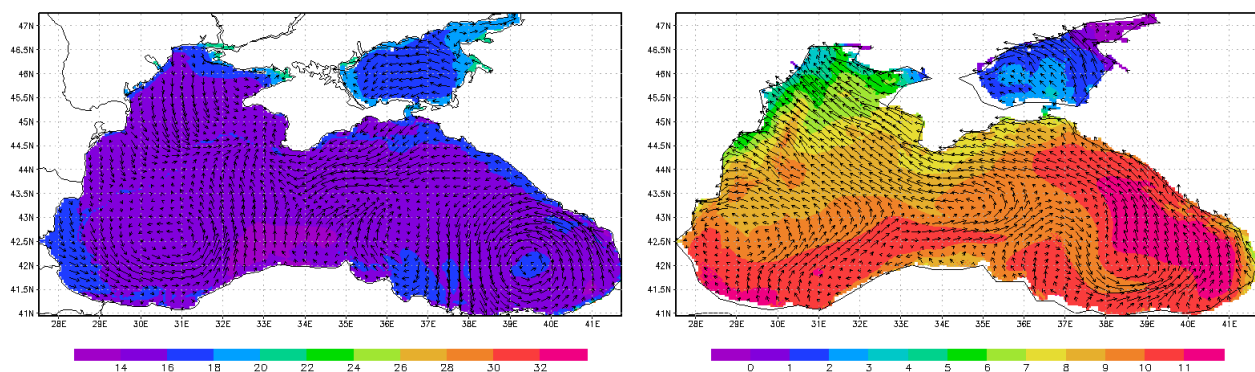


Рис. 15: Результаты расчета параллельной версии в акватории Черного и Азовского морей на 19.05.07 и 27.12.07 соответственно. Цветом показано распределение приповерхностной температуры ($^{\circ}\text{C}$), векторами - приповерхностное поле скоростей

Параллельная версия модели на 48 процессорах в режиме HCNC сравнивалась с последовательной версией. Расчет проводился в акватории Черного и Азовского морей с теми же параметрами, что и при годовом расчете. На рис.16 и рис.17 представлено сравнение рассчитанных уровней океана.

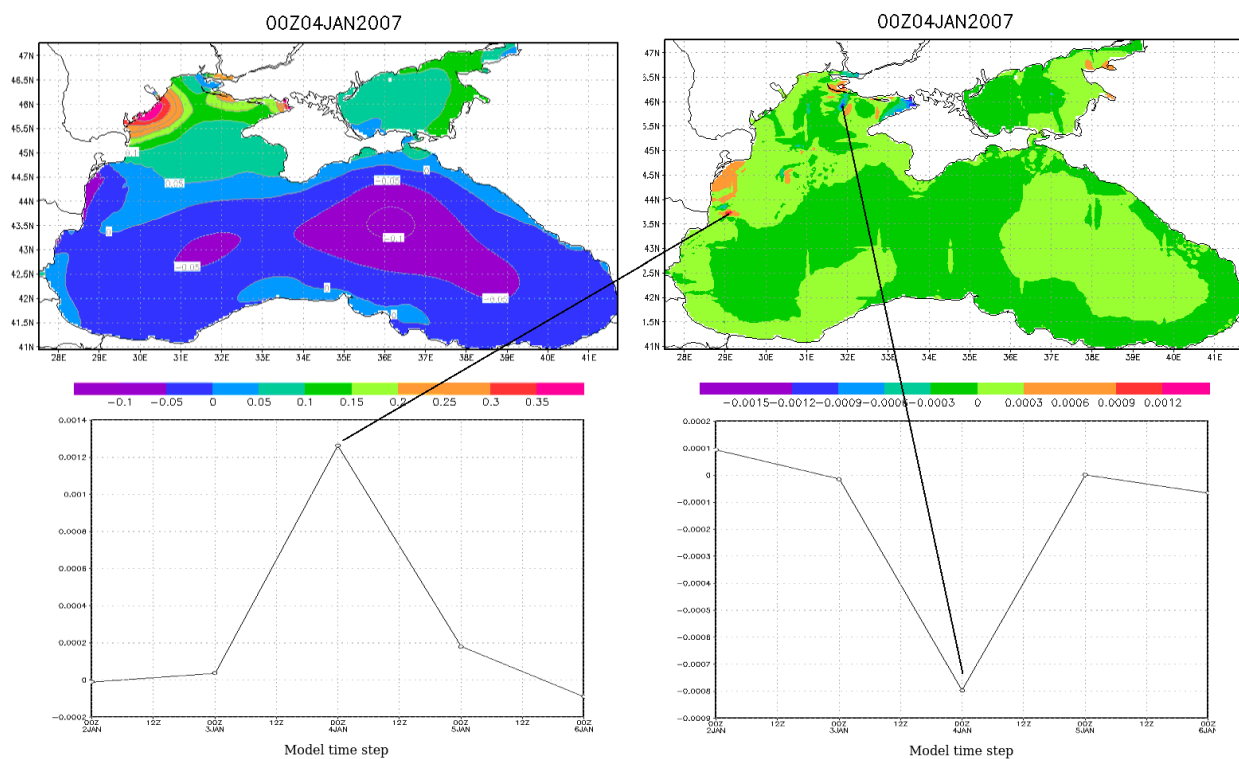


Рис. 16: Верхний левый угол: результаты расчета уровня океана (в метрах) на 3 день. Верхний правый угол: разница уровней океана (в метрах) на 3 день, рассчитанных с помощью параллельной версии и последовательной. Нижние рисунки: динамика разницы уровней в двух точках, графики на 5 дней.

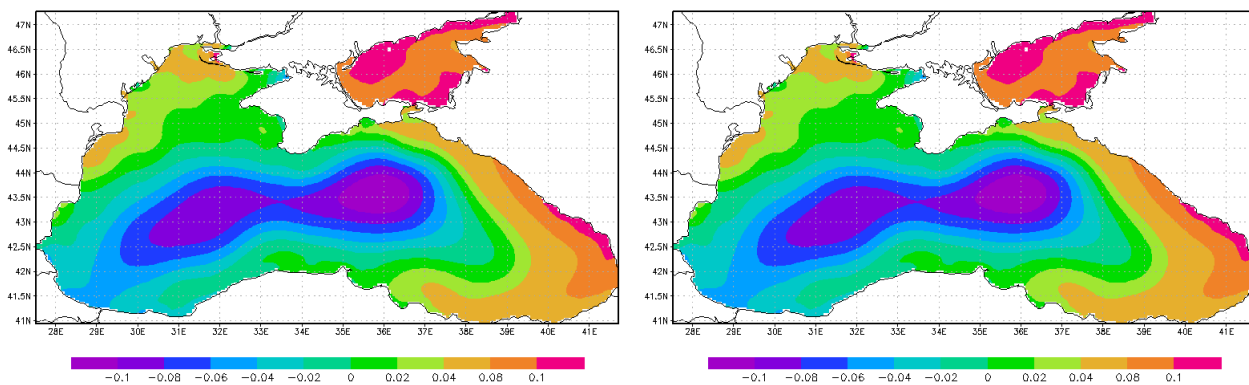


Рис. 17: Результаты расчета уровня океана (в метрах) последовательной и параллельной версии модели соответственно. Акватория Черного и Азовского морей, расчет на 5 дней

7 Выводы

Реализована параллельная версия новой сигма-модели циркуляции океана. Параллельная версия позволяет использовать массивно-параллельные вычислительные системы и считать циркуляцию океана с большим разрешением. Были предложены три режима работы параллельной версии модели: HCNC, LCHC и гибридный режим MPI + OpenMP. Проведено тестирование и сравнения их масштабируемости. Показано, что режим HCNC дает результаты лучше, чем режим LCHC на небольшом количестве процессоров по причине лишних вычислений в режиме LCHC. Но на большем количестве процессоров режим LCHC ведет себя лучше режима HCNC по причине большой затраты времени на коммуникационные задержки в режиме HCNC. Также показана эффективность гибридного режима в сравнении с чистым MPI (в HCNC режиме) на большем количестве процессоров. Реализованы параллельные процедуры чтения-записи модели средствами MPI-IO. Параллельная версия модели тестировалась в акватории Черного и Азовского морей, был проведен годовой расчет. Также отдельно тестировалась параллельная версия блока расчета быстрых баротропных волн на стандартном тесте для нелинейных уравнений мелкой воды на сфере.

8 Список литературы

- [1] Гилл А. Динамика атмосферы и океана. Т.1. Пер. с англ. М.:Мир, 1986. 316 с.
- [2] Дианский Н.А. Моделирование циркуляции океана и исследование его реакции на короткопериодные и долгопериодные атмосферные воздействия. М: Физмалит, 2012. 252 с.
- [3] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М: Наука, 1989. 608 с.
- [4] Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М: Мир, 1980. 618 с.
- [5] Калмыков В.В., Ибраев Р. А. Алгоритм с перекрытиями для решения системы уравнений мелкой воды на параллельных компьютерах с распределенной памятью. Вестник УГАТУ, Т.17, №5 (58). 252-259 с.
- [6] Залесный В. Б. Моделирование крупномасштабных движений в Мировом океане. В кн. Вычислительные методы в прикладной математике под ред. Ж.-П. Лионса и Г.И. Марчука. М.: Наука, 1982. 196-212 с.
- [7] Алексеев В.В., Залесный В.Б. Численная модель крупномасштабной динамики океана. Вычислительные процессы и системы Ред. Марчук Г.И. Вып. 10. М: Наука, 1993. 232-252 с.
- [8] George L. Mellor. User guide for a three-dimensional, primitive equation, numerical ocean model. Princeton University
- [9] Guansuo Wang, Fangli Qiao, Changshui Xia. Parallelization of a coupled wave-circulation model and its application. Ocean Dynamics (2010) 60:331-339

- [10] David L. Williamson, John B. Drake, James J. Hack, Rudiger Jakob, Paul N. Swarztrauber. A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry.
- [11] William Gropp. Introduction to MPI IO. URL: www.cs.illinois.edu/~wgropp
- [12] Arakawa A., Lamb V.R. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. Methods in computational Physics. V.17
- [13] Mesinger F., Arakawa A. Numerical methods used in atmospheric models. JOC, GARP Publication Series. 1976. V.1, No. 17.
- [14] J.O. Houghton, Y. Ding, and D.J. Griggs et al. Ipcc third assessment report. Intergovernmental Panel on Climate Change , page 881, Cambridge 2001.
- [15] Solomon S.D., Qin D., Manning M., Chen Z., Marquis M., Averyt K.B., Tignor M., and Miller H.L. Ipcc fourth assessment report. Intergovernmental Panel on Climate Change , Chambridge University Press, 2007.
- [16] WMO: World Meteorological Organization. The Physical Basis of Climate and Climate Modelling. 16. GARP Publications, 1975.
- [17] Володин Е.М., Дианский Н.А., Гусев А.В. Воспроизведение современного климата с помощью совместной модели общей циркуляции атмосферы и океана INMCM 4.0. Известия РАН. Физика атмосферы и океана, 2010, т.46, №4, с 448-466.
- [18] Володин Е.М., Дианский Н.А., Гусев А.В. Модель земной системы INMCM4: воспроизведение и прогноз климатических изменений в 19-21 веках. Известия РАН. Физика атмосферы и океана, 2013, т.49, №4, с 379-400.
- [19] Гусев А.В. Численная модель гидродинамики океана в криволинейных координатах для воспроизведения циркуляции мирового океана и его отдельных акваторий. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, Москва, ИВМ РАН, 2009, 144 с.
- [20] Кластер ИВМ РАН. URL: <http://cluster2.inm.ras.ru>
- [21] Blumberg A.F., Mellor G.L. A description of a three-dimensional coastal ocean circulation model // Three-Dimensional Coastal Model / Ed.: N.S. Heaps. Amer. Geophys. Union. 1987.
- [22] Ибраев Р.А., Хабеев Р.Н., Ушаков К.В. Вихреразрешающая 1/10 модель Мирового океана. Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана. 2012. Т. 48. № 1. С. 45-55.
- [23] G. Sannino, V. Artale. An hybrid OpenMP-MPI Parallelization of the Princeton Ocean Model.
- [24] ERA-Interim. URL: <http://apps.ecmwf.int/datasets/>

[25] Gent P.R, Bryan F.O., Danabasoglu G., Doney S.C., Holland W.R., Large W.G., and McWilliams C. The ncar climate system model global ocean component. J. Climate. , V.11(No.6):P.1287-1306, 1998.

[26] Redi M. Isopycnal mixing by coordinate rotation. J. Phys. Oceanogr. , V.12:P.1154-1158, 1982.

[27] Cox M.D. Isopycnal diffusion in z-coordinate ocean model. Ocean Modelling , V.74:P.1-5, 1987.

[28] К.М. Терехов. Параллельная реализация модели общей циркуляции океана. Сборник тезисов лучших дипломных работ 2010. ВММК МГУ, Москва: МАКС ПРЕСС, 2010. С. 30–31.