



Серия
Суперкомпьютерное
Образование

В. Н. Лыкосов, А. В. Глазунов, Д. В. Кулямин,
Е. В. Мортиков, В. М. Степаненко

Суперкомпьютерное моделирование в физике климатической системы



Суперкомпьютерный
консорциум
университетов России





Серия
Суперкомпьютерное
Образование

**Координационный совет
системы научно-образовательных центров
суперкомпьютерных технологий**

Председатель Координационного совета

В.А. Садовничий,
ректор МГУ имени М. В. Ломоносова, академик

Заместители председателя совета

Е.И. Моисеев,
декан факультета вычислительной математики и кибернетики
МГУ имени М. В. Ломоносова,
академик

А.В. Тихонравов,
директор Научно-исследовательского вычислительного центра
МГУ имени М. В. Ломоносова,
профессор

Члены совета

В.Н. Васильев, ректор Санкт-Петербургского национального исследовательского государственного университета информационных технологий, механики и оптики, чл.-корр. РАН, профессор; **В.Г. Захаревич,** ректор Южного федерального университета, профессор; **Н.Н. Кудрявцев,** ректор Московского физико-технического института, чл.-корр. РАН, профессор; **Г.В. Майер,** ректор национального исследовательского Томского государственного университета, профессор; **А.А. Фаткулин,** проректор по науке и инновациям Дальневосточного федерального университета, профессор; **Е.В. Чупрунов,** ректор национального исследовательского Нижегородского государственного университета, профессор; **А.Л. Шестаков,** ректор национального исследовательского Южно-Уральского государственного университета, профессор; **В.Н. Чубариков,** декан механико-математического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, профессор; **М.И. Панасюк,** директор Научно-исследовательского института ядерной физики МГУ имени М.В. Ломоносова, профессор; **Вл.В. Воеводин,** заместитель директора Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ имени М.В. Ломоносова, чл.-корр. РАН, профессор, исполнительный директор НОЦ «СКТ-Центр».



Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова

В.Н. Лыков, А.В. Глазунов, Д.В. Кулямин,
Е.В. Мортиков, В.М. Степаненко

Суперкомпьютерное моделирование в физике климатической системы

*Допущено УМО по классическому университетскому образованию
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по направлениям ВПО
010400 «Прикладная математика и информатика»
и 010300 «Фундаментальная информатика
и информационные технологии»*



Издательство Московского университета

2012

УДК 007 (075)
ББК 32.973.2
С89

Суперкомпьютерное моделирование в физике климатической системы: Учеб. Пособие / В.Н. Лыкосов и др. Предисл.: В.А. Садовничий. – М.: Издательство Московского университета, 2012. – 408 с., илл. – (Серия «Суперкомпьютерное образование»)
ISBN 978-5-211-06341-9

С89

В книге излагаются базовые основы построения математических моделей при решении задач физики климатической системы, приводятся методы их конечномерной аппроксимации и возникающие при этом основные численные алгоритмы, обсуждаются суперкомпьютерные технологии численной реализации моделей. В качестве иллюстрации изложенных подходов рассматриваются: задача моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации, проблема вихреразрешающего воспроизведения динамики геофизических пограничных слоев, задача моделирования региональных особенностей атмосферной циркуляции, проблема воспроизведения современного климата и оценки его возможных в будущем изменений. Книга рассчитана на специалистов в области наук о климатической системе Земли, преподавателей, аспирантов и может быть использована в качестве учебного пособия для студентов естественнонаучных специальностей.

Ключевые слова: климатическая система, климат, изменения климата, крупномасштабные процессы, мезомасштабные процессы, геофизическая турбулентность, математическое моделирование, вихреразрешающее моделирование, численная модель, параллельные вычисления, параллельное программирование, суперкомпьютерные технологии.

**УДК 007 (075)
ББК 32.973.2**

ISBN 978-5-211-06341-9

© Коллектив авторов, 2012
© Издательство Московского университета, 2012

Уважаемый читатель!

Вы держите в руках одну из книг серии «Суперкомпьютерное образование», выпущенную в рамках реализации проекта комиссии Президента РФ по модернизации и технологическому развитию экономики России «Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения». Инициатором издания выступил Суперкомпьютерный консорциум университетов России.

Серия включает более 20 учебников и учебных пособий, подготовленных ведущими отечественными специалистами в области суперкомпьютерных технологий. В книгах представлен ценный опыт преподавания суперкомпьютерных технологий в таких авторитетных вузах России, как МГУ, ННГУ, ТГУ, ЮУрГУ, СПбГУ ИТМО и многих других. При подготовке изданий были учтены рекомендации, сформулированные в Своде знаний и умений в области суперкомпьютерных технологий, подготовленном группой экспертов Суперкомпьютерного консорциума, а также международный опыт.

Современный уровень развития вычислительной техники и методов математического моделирования дает уникальную возможность для перевода промышленного производства и научных исследований на качественно новый этап. Эффективность такого перехода напрямую зависит от наличия достаточного числа высококвалифицированных специалистов. Данная серия книг предназначена для широкого круга студентов, аспирантов и специалистов, желающих изучить и практически использовать параллельные компьютерные системы для решения трудоемких вычислительных задач.

Издание серии «Суперкомпьютерное образование» наглядно демонстрирует тот вклад, который внесли участники Суперкомпьютерного консорциума университетов России в создание национальной системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий, а также их четкое понимание ответственности за подготовку высококвалифицированных специалистов и формирование прочного научного фундамента, столь необходимого для эффективного использования суперкомпьютерных технологий на практике.

Ректор Московского университета,
Президент Суперкомпьютерного консорциума университетов России,
академик РАН *В.А. Садовничий*

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	7
ГЛАВА 1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВА ИССЛЕДОВАНИЯ КЛИМАТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ	15
1.1. Основные компоненты климатической системы и их взаимодействия	16
1.2. Базовые принципы построения геофизических моделей	27
1.3. Основные уравнения гидротермодинамики крупномасштабных процессов	31
1.4. Вертикальные координаты	37
1.5. Разделение масштабов и региональные модели	45
1.6. Вихреразрешающие модели турбулентности	59
ГЛАВА 2. ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ПОДСЕТОЧНЫХ МАСШТАБОВ	73
2.1. Пограничный слой атмосферы	73
2.2. Процессы обмена в приземном слое атмосферы	85
2.3. Взаимодействие атмосферы с сушей и криосферой	91
2.4. Химия атмосферы и радиационные процессы	99
2.5. Облачность и конвекция	106
2.6. Гравитационно-волновое сопротивление и ионное трение	116
ГЛАВА 3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	122
3.1. Основные методы дискретизации уравнений математической физики	122
3.2. Некоторые вычислительные аспекты моделирования климатических процессов	132
3.3. Пример построения вычислительной технологии для моделирования локальной циркуляции	144
3.4. Специфика вычислительной технологии для области со сложной геометрией	157
ГЛАВА 4. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ	163
4.1. Суперкомпьютер как инструмент численного моделирования в физике климатической системы	163
4.2. Технологии параллельного программирования	167
4.3. Реализация моделей на вычислительных системах с распределенной памятью	179
4.4. Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений	183
4.5. Итерационные методы	191
4.6. Проблемы масштабируемости на разных вычислительных архитектурах	209
ГЛАВА 5. ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ФИЗИКИ КЛИМАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ	215
5.1. Течение вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации	215
5.2. Вихреразрешающее моделирование геофизических пограничных слоев	227
5.3. Мезомасштабные процессы	246
5.4. Моделирование климата и его изменений	256
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	269
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	271

ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее важных задач, стоящих перед наукой в XXI столетии, является проблема предсказания климатических изменений, вызываемых человеческой деятельностью. В качестве антропогенных воздействий на климатическую систему можно рассматривать сжигание ископаемого топлива, приводящее к изменению концентрации углекислого газа в атмосфере, изменение концентрации малых газовых примесей, контролирующих концентрацию озона в атмосфере, вырубку лесов, приводящую к изменению альбедо и процессу опустынивания, и многие другие воздействия. Не менее важной является и естественная изменчивость климата, которая может также вносить существенный вклад в общую картину изменений климата. К наиболее значимым проявлениям собственной изменчивости климатической системы Земли следует отнести такие явления, как Эль-Ниньо-Южное колебание, Северо-Атлантическое колебание, Арктическая осцилляция. Эти явления оказывают существенное влияние на текущее состояние атмосферы и океана и могут изменять свою интенсивность и повторяемость на фоне изменений климата, вызванных внешними воздействиями.

Согласно определению Всемирной метеорологической организации (WMO, 1975), климатическую систему планеты Земля образуют следующие, взаимодействующие между собой, компоненты: (i) атмосфера – газовая оболочка Земли сложного состава (кислород, азот, углекислый газ, водяной пар, озон и т.д.), воздействующая на перенос к поверхности Земли солнечной радиации, поступающей на ее верхнюю границу, и являющаяся наиболее изменчивой составляющей рассматриваемой системы; (ii) океан – главный водный резервуар в системе, состоящий из соленых вод Мирового океана и прилегающих к нему морей, поглощающий основную часть поступающей на его поверхность солнечной радиации и представляющий собой, благодаря высокой теплоемкости воды, мощный аккумулятор энергии; (iii) суша – поверхность континентов с ее гидрологической системой (внутренние водоемы, болота и реки) и почва (в том числе, с грунтовыми водами); (iv) криосфера – континентальные и морские льды, горные ледники и снежный покров, криолитозона ("вечная мерзлота"); (v) биота – растительность на суше и океане, а также живые организмы в воздухе, море и на суше, включая человека.

Динамика климатической системы определяется тремя группами факторов (Монин, 1982): (1) внешние (астрономические) факторы: активность Солнца, движение Земли вокруг Солнца, наклон ее оси вращения к плоскости орбиты и скорость вращения; (2) внешние (по отношению к системе) геофизические факторы: размер и масса Земли, скорость ее вращения вокруг оси, внутренние термодинамические процессы и связанные с ними геотермический поток тепла и вулканизм; (3) внутренние геофизические факторы (свойства системы): масса и состав атмосферы и океана, особенности подстилающей поверхности (географическое распределение континентов и океанов, рельеф поверхности суши), рельеф дна океана, структура деятельного слоя суши. Если сопоставить различные части климатической системы, то оказывается, что: (i) масса атмосферы равна $5.3 \cdot 10^{15}$ т, ее удельная теплоемкость составляет величину 10^3 Дж/(кгК), в то время как полная теплоемкость равна $5.32 \cdot 10^{15}$ МДж/К; (ii) масса верхнего слоя сезонных колебаний температуры в океане (средней толщиной в 240 м) равна $8.7 \cdot 10^{16}$ т, его удельная теплоемкость выражается величиной $4.19 \cdot 10^3$ Дж/(кгК), а полная теплоемкость равна $36.45 \cdot 10^{16}$ МДж/К; (iii) масса деятельного слоя суши (средней толщиной в 10 м) равна $3 \cdot 10^{15}$ т, его удельная теплоемкость составляет величину $0.8 \cdot 10^3$ Дж/(кгК), а полная теплоемкость оценивается как $2.38 \cdot 10^{15}$ МДж/К. Отсюда видно, что массы атмосферы, сезонного слоя океана и деятельного слоя суши соотносятся как 1:16.4:0.55, а их теплоемкости – как 1:68.5:0.45. Это означает, что в механическом и тепловом отношении океан является наиболее инерционным звеном климатической системы.

Геофизические течения включают широкий диапазон движений: крупномасштабные, формирующие общую циркуляцию атмосферы и океана,

мезомасштабные явления типа рэлеевской конвекции и образование кучевой облачности, волновые движения, в том числе, внутренние, поверхностные и приливные волны, формирование и распространение фронтов, опасные явления, такие как штормы, смерчи и торнадо, мелкомасштабную турбулентность и др. Из класса геофизических течений можно выделить специальный подкласс, являющийся объектом геофизической гидродинамики, для описания которого используются особые уравнения движения, получаемые из исходной системы гидродинамических уравнений путем фильтрации быстрых составляющих (Должанский, 2011).

Исторически математическое моделирование в приложении к физике атмосферы началось с постановки и решения задачи о гидродинамическом численном прогнозе погоды. По своей сути, прогноз погоды есть решение задачи Коши на конечном промежутке времени T . Можно выделить три категории прогнозов в зависимости от их заблаговременности T (Бенгтсон, 1988): краткосрочный (до 3 дней) прогноз, который определяется главным образом исходным состоянием атмосферы (начальными условиями); среднесрочный (до двух недель) прогноз, при котором требуется как детальная информация об исходных полях метеорологических элементов, так и адекватное описание воздействий внешних факторов («граничных условий») и долгосрочный (до сезона) прогноз, который в большей степени зависит от краевых, чем от начальных условий, и включает в себя элементы моделирования климата.

Впервые проблема прогноза погоды как задача математики и механики была сформулирована в опубликованной в 1904 г. статье В. Бьеркнеса (Bjerknes, 1904, см. также Монин, 1969), в которой эта проблема рассматривалась как задача с начальными условиями для уравнений гидромеханики бароклиной жидкости. В. Бьеркнес писал: *«Если, как полагает любой ученый, верно, что последующие состояния атмосферы формируются из предыдущих в соответствии с физическими законами, то очевидны необходимые и достаточные условия для рационального решения проблем прогноза: достаточно точное знание начального состояния атмосферы и достаточно точное знание законов, согласно которым одно состояние атмосферы развивается из другого»*. Он понимал, что поскольку проблема прогноза погоды чрезвычайно сложна, то для ее решения потребуются гигантские усилия и длительное время, но надеялся на успех и позже (Bjerknes, 1914) так сформулировал эту надежду: *«Я буду более чем счастлив, если смогу продолжать работу до тех пор, пока в результате многолетних вычислений не буду в состоянии предсказывать погоду с одного дня на другой. Если расчеты окажутся в согласии с фактами, это будет означать научную победу. Метеорология тогда стала бы точной наукой...»*.

В начале 20-х годов XX-го столетия Л. Ричардсоном была предложена методология численного прогноза погоды (Richardson, 1922). Поскольку в качестве начальных условий требуется использовать информацию о реальном состоянии атмосферы во всей ее толще, им были также разработаны приборы для атмосферных измерений на высотах, достигающих нескольких километров над подстилающей поверхностью. При построении теории численного прогноза погоды Ричардсон внес большой вклад в исследования турбулентности пограничного слоя атмосферы, радиационных процессов и термодинамики атмосферы.

Однако, попытка практического прогноза на один день (на 20 мая 1910 г. для района Нюрнберг-Аугсбург, Германия) численным методом (с помощью существовавших тогда вычислительных средств типа логарифмических линеек и механических калькуляторов) не удалась: рассчитанное приземное давление выросло за 6 часов на 145 гПа, что в 50 раз превысило наблюдавшуюся тенденцию. Это было связано с тем, что: (1) в качестве начальных условий были использованы лишь наземные данные небольшой сети метеорологических станций в Европе; (2) использованный Ричардсоном конечно-разностный метод оказался вычислительно неустойчивым (критерий Куранта-Фридрихса-Леви для соотношения пространственного и временного шагов был

установлен позже: Courant et al., 1928); (3) уравнения гидродинамики атмосферы, использованные в прогностической схеме, наряду с относительно медленными движениями, ответственными за синоптические процессы, описывали также всевозможные «шумы» типа акустических и гравитационных волн, фильтрация которых в начальный момент времени также не была проведена.

Ричардсоном была предложена своеобразная «технология» реализации численного прогноза: коллектив из 64000 вычислителей производит расчет погоды для территории всего Земного шара (2000 узлов конечно-разностной сетки по горизонтали и 32 уровня), а главный прогнозист подобно дирижеру организует поступление к нему информации от всех остальных участников процесса. Вот как он описывает (Richardson, 1922, ch. 11/2) "фабрику прогноза": *«Представьте себе большой зал, похожий на театр, но с галереями и балконами, расположенными по кругу и проходящими через то место, где обычно находится сцена. Стены этого зала разрисованы в виде карты Земного шара. Потолок представляет собой северные полярные области, Англия расположена на галерее, тропики – там, где балконы верхнего яруса, Австралия – где бельэтаж, а Антарктида – где партер. Громадное количество вычислителей заняты работой: каждый рассчитывает погоду для той части Земного шара, где он сидит, отвечая за вычисления одного уравнения или даже части уравнения. Работа для каждого региона координируется исполнителем более высокого ранга. Многочисленные светящиеся числа показывают мгновенные значения так, что соседние вычислители могут их прочитать. Каждое число высвечивается в трех соприкасающихся зонах, поддерживая тем самым коммуникации с севером и югом. Из пола партера на половину высоты зала возвышается столб с кафедрой, за которой находится человек, ответственный за весь театр. Он окружен несколькими ассистентами и курьерами. Одна из его обязанностей – поддерживать постоянную скорость вычислений в различных частях Земного шара. В этом отношении он похож на дирижера оркестром, в котором инструментами являются логарифмические линейки и вычислительные машины. Но вместо того, чтобы размахивать палочкой, он светит розовым лучом на области, расчет для которых идет быстрее остальных, а синим – на запаздывающие области».*

В каком-то смысле, уже в то время была предвосхищена идея параллельных вычислений, осуществляемых на современных параллельных вычислительных системах: распределение вычислений между процессорами, обмена данными между ними и их равномерная нагрузка.

Одна из причин неудачной попытки Ричардсона, а именно, связанная с наличием «шумов» в синоптических движениях, была устранена И.А. Кибелем (1940). Предложенный им фундаментальный принцип упрощения уравнений гидродинамики атмосферы (асимптотическое «квазигеострофическое разложение») позволил разработать процедуру фильтрации из решений уравнений несущественных для погоды метеорологических шумов и послужил основой для создания гидродинамической теории краткосрочных прогнозов погоды (Обухов, 1949, Кибель, 1957). Центральной проблемой теории климата, сформулированной в первой половине двадцатого века, стала задача воспроизведения основных характеристик атмосферной циркуляции с помощью математических моделей (Дородницын и др., 1939). В этой работе под математической теорией общей циркуляции атмосферы понималась возможность ее описания с помощью уравнений геофизической гидродинамики.

Появление электронно-вычислительных машин позволило в начале 50-х годов XX-го века осуществить (Charney et al., 1950) первый “практический” численный прогноз погоды (использована модель, основанная на баротропном уравнении вихря). Это была реализация начального этапа плана метеорологической исследовательской группы в Институте перспективных исследований (Принстон, США) по созданию серии моделей, шаг за шагом все лучше и лучше воспроизводящих реальное состояние атмосферы. Одним из соавторов цитированной работы был Дж. фон Нейман, который считал прогноз погоды

одной из тех проблем, которые могут быть решены с помощью компьютеров. Расчеты были проведены на первом программируемом компьютере ENIAC (**E**lectronic **N**umerical **I**ntegrator and **C**omputer) с тактовой частотой 100 кГц, на десятичной основе, с памятью для 20 чисел (память для программы отсутствовала) и производительностью 5000 сложений и 300 умножений в секунду (Хартрей, 1948). Для прогноза на сутки с шагом 3 часа по ограниченной территории на сетке из 270 узлов с шагом 736 км (соответствует 8° на широте 45°) потребовалось почти 24 часа (выполнено 10^6 операций умножения и деления), причем львиную долю этого времени заняли ручные операции, связанные, в частности, с сортировкой, вводом и выводом перфокарт. Для вывода результатов расчетов на печать было использовано около 10^5 перфокарт. Важным выводом статьи (Charney et al., 1950) стало заключение о принципиальной возможности оперативного решения задачи прогноза погоды численными методами с использованием более совершенной (в частности, за счет исключения не арифметических операций) вычислительной техники.

В 1956 году опубликованы результаты первого численного эксперимента по воспроизведению общей циркуляции атмосферы с помощью двухслойной, квазигеострофической, «полусферной» модели (Phillips, 1956). В этой модели ветер рассчитывался на уровнях 750 и 250 гПа, а температура – на промежуточном уровне 500 гПа. Модель была полусферной в том смысле, что размер прямоугольной расчетной области по меридиану составлял 10^4 км (17 точек от экватора до Северного полюса с шагом 625 км), а по долготе (16 точек с шагом 375 км) выбирался таким, чтобы описать одно большое бароклинное возмущение ($\sim (5-6) \cdot 10^3$ км). Вычисления проводились на компьютере EDVAC (**E**lectronic **D**iscrete **V**ariable **A**utomatic **C**omputer) той же производительности, что и ENIAC, но с двоичной основой, оперативной памятью в 1024 слова (часть этой памяти отводилась под программный код), и, кроме того, с памятью на магнитном барабане емкостью 2048 слов (Lewis, 1998). Для расчета на один месяц с шагом 1 час требовалось 11-12 часов машинного времени.

В начале 60-х годов появилась первая 9-уровневая модель, основанная на полных (неупрощенных) уравнениях (Smagorinsky, 1963). В качестве расчетной области в этой работе принят зональный канал с границами на экваторе и на 64.4° с.ш. Использовалась конечно-разностная сетка с разрешением 5° . Важно, что к этому времени появились алгоритмические языки (в частности, Фортран), что позволило «автоматизировать» разработку программного кода модели. Расчеты на одни сутки на IBM 7090 с оперативной памятью в 32 тыс. слов и производительностью около 300 тыс. операций в секунду занимали 20 мин.

Параллельно с атмосферными моделями стали разрабатываться и модели общей циркуляции океана (Саркисян, 1966, Bryan, 1969). В 1969 г. были опубликованы (Manabe and Bryan, 1969) результаты численных экспериментов с первой совместной моделью общей циркуляции атмосферы и океана, в которой расчетная область представляла собой часть сферы от 81.7° ю.ш. до 81.7° с.ш. и от 60° з.д. до 60° в.д. При этом было использовано не реальное распределение материков и океанов, а некоторая его произвольная схематизация в виде одного океана и одного континента. Разрешение в модели атмосферы составляло 472 км по горизонтали и 9 уровней по вертикали, в океане – 5 горизонтов до глубины 3 км, 6° по широте и переменное (от 1° до 3°) разрешение по долготе. Эти эксперименты были проведены на трехпроцессорной вычислительной системе UNIVAC 1108 (**U**niversal **A**utomatic **C**omputer, <http://www.websters-online-dictionary.org/definitions/UNIVAC>) с оперативной памятью до 256 тыс. слов и пиковой производительностью в 2 млн. операций в секунду.

Характерные времена термической релаксации атмосферы и океана отличаются на два порядка. Поскольку время релаксации совместной модели должно быть не меньше максимального из этих двух времен, то прямое моделирование взаимодействия

атмосферы и океана на несколько сотен лет (до достижения равновесного состояния) представляло в 60-х годах XX века в вычислительном отношении неразрешимую задачу, поскольку время расчета на сутки одного только атмосферного блока модели составляло 45 мин. (Manabe and Bryan, 1969). Для преодоления этой трудности был предложен метод искусственной синхронизации времен термической релаксации атмосферы и океана, согласно которому один модельный атмосферный год соответствовал ста модельным океанским годам.

Следует отметить, что совершенствование геофизических моделей базировалось не только на успехах вычислительной техники, но и на ряде фундаментальных результатов, достигнутых в развитии вычислительной математики, в том числе, численных методов решения уравнений в частных производных. Прежде всего необходимо отметить работу (Courant et al., 1928), в которой использован метод конечных разностей для доказательства существования и приближенного построения решений задачи Коши и краевых задач для уравнений различных типов. Впервые было показано, что соотношение временных и пространственных шагов в разностных уравнениях, соответствующих задачам для дифференциальных уравнений гиперболического и параболического типа, должно удовлетворять некоторому критерию, чтобы обеспечить сходимость и устойчивость разностной схемы. В 1958 г. В.И. Лебедевым опубликована работа, в которой для решения задачи динамики вращающейся жидкости предложено использовать смещенные сетки: сеточные функции для компонент скорости и для давления определялись на разных множествах точек. Позднее, в публикациях (Arakawa, 1972, Arakawa and Lamb, 1977) были предложены более общие сдвинутые сетки, которые получили широкое распространение в задачах моделирования геофизических процессов.

Как известно (см., например, Марчук и др., 1987), нелинейная динамика двумерной невязкой несжимаемой жидкости характеризуется наличием двух важных законов сохранения – энергии и энтропии (квадрата завихренности), и как следствие, законом сохранения среднего волнового числа. Это означает, что переходы энергии от одних масштабов к другим через нелинейные взаимодействия не могут происходить произвольным образом. Нарушение этих законов в разностных аналогах соответствующих уравнений движения приводит к возникновению нелинейной неустойчивости. В работе (Arakawa, 1966), по-видимому, впервые было обращено внимание на необходимость построения консервативных разностных схем в задачах прогноза погоды и моделирования климата. Важное значение имело развитие методов решения многомерных нестационарных задач для уравнений в частных производных методом расщепления с использованием законов сохранения (Марчук, 1967, 1973), основу которого составляет редукция сложного оператора к произведению простейших. При таком подходе интегрирование исходной системы уравнений динамики сводится к последовательному интегрированию более простых уравнений.

В России разработка гидродинамических климатических моделей началась в 70-х годах. В 1973 г. по инициативе Г.И. Марчука Отделением океанологии, физики атмосферы и географии АН СССР было принято решение о разработке математических моделей климата, основанных на моделях общей циркуляции атмосферы и океана. Упрощенный вариант, включающий модель общей циркуляции атмосферы и описание динамики верхнего слоя океана, был предложен и реализован Зилитинкевичем и др. (1976), но он не получил дальнейшего развития. Совместная модель общей циркуляции атмосферы и океана, вычислительная технология которой базировалась на использовании законов сохранения и неявных методов расщепления, была построена в Вычислительном центре СО АН СССР (Марчук и др., 1975, 1980, 1984). Важной особенностью публикации 1984 г. являлось то, что в этой книге, по-видимому, впервые проблема моделирования общей циркуляции атмосферы и океана обсуждалась во всем ее многообразии – от физической постановки и ее математической формулировки до вычислительной

технологии.

Численные эксперименты с этой моделью проводились на вычислительных системах БЭСМ-6 (разрешение атмосферного блока: 10^0 по долготе, 6^0 по широте и три уровня по вертикали до высоты 14 км, 3240 узлов конечно-разностной сетки; океанского: 5^0 по долготе и широте, 4 горизонта до глубины 4 км, 7200 узлов сетки) и CRAY-1 (5^0 по долготе и широте, 6 атмосферных уровней, 8 океанских горизонтов, 15552 сеточных узла в атмосфере и 14400 узлов – в океане). Первая из этих систем – машина с тактовой частотой 10 МГц, выполнявшая около 1 млн. одноадресных операций в секунду и имевшая оперативную память от 32 до 128 тыс. 48-битных слов, а также память на магнитных барабанах емкостью 512 тыс. слов (Королев, 1978). К центральному процессору подключались также лентопротяжные механизмы емкостью до 1 млн. слов каждый. Работа арифметического устройства (процессора) была совмещена с выборкой операндов из памяти. Компьютер CRAY-1 выполнял 80 млн. операций в секунду, имел оперативную память от 250 тыс. до 1 млн. 64-битных слов и наряду с магнитными лентами также дисковую память объемом до 10 Гбайт (CRAY, 1977). Кроме скалярных в этой системе использовались и векторные операции, представляющие собой независимую и однотипную обработку координат векторов фиксированной длины.

Расчеты на БЭСМ-6 проводились с шагом по времени 40 мин для атмосферного блока и 2 суток – для океанского, причем использовалась процедура синхронизации времен обмена информацией между двумя этими блоками (Марчук и др., 1984). Эксперимент на 11 «океанских» лет, что соответствовало 40 «атмосферным» дням, занял около 3 месяцев реального времени, в которое вошло как собственно время вычислений, так и затраты на сопровождение эксперимента (копирование информации на магнитные ленты, восстановление данных после сбоев и т.п.).

Разработанный для БЭСМ-6 программный код модели не был оптимизирован с точки зрения возможного использования конвейерных вычислений. Имевшийся на CRAY-1 транслятор с языка Фортран оптимизировал исполняемый код, если в исходной программе отсутствовали циклы, в которых содержались: обращения к подпрограммам и функциям, условные операторы, нелинейные индексы, рекурсивная обработка массивов, присваивание результатов векторных вычислений скалярным величинам. При этом стандартные функции (тригонометрические, логарифмические, гиперболические и т.п.) автоматически заменялись при трансляции на соответствующие векторные аналоги из системных библиотек математического обеспечения. При переносе программного кода с БЭСМ-6 на CRAY-1 были учтены особенности архитектуры этого компьютера, что позволило примерно в 5 раз уменьшить (по сравнению с исходной «скалярной» версией) затраты на проведение численного эксперимента и, тем самым, увеличить модельное время, на которое можно было выполнять такие расчеты. Это важно, поскольку при моделировании климатической системы приходится оперировать как с годовыми, так и многолетними и вековыми изменениями климата.

Возможности вычислительной техники того времени и недостаточная детальность параметризаций физических процессов в атмосфере и океане не позволили тогда добиться необходимого качества воспроизведения климата (в частности, проявлялся так называемый «дрейф» климата – все нарастающее отклонение расчетных характеристик от наблюдаемых), отвечающего современным требованиям. Тем не менее, перечисленные выше работы послужили существенным заданием дальнейшего развития климатического моделирования как в мире в целом, так и в России. Кроме того, было продемонстрировано, что прогресс в развитии вычислительной техники позволяет строить все более точные модели конкретных физических процессов и, тем самым, не только совершенствовать модели климата и технологии прогноза погоды, но и формулировать новые задачи и, в соответствии с этим, новые требования к вычислительным системам. Более того, хотя основным методом исследования климатической системы является

математическое (численное) моделирование, однако, имеет место фундаментальная проблема, сформулированная В.П. Дымниковым: что и с какой точностью должна воспроизводить климатическая модель, чтобы ее чувствительность к разнообразным малым внешним воздействиям была близка к чувствительности реальной климатической системы? Ответ на этот вопрос следует искать в рамках математической теории климата (Дымников и Филатов, 1994, Dymnikov and Filatov, 1996), в основе которой лежат методы исследования динамических систем.

Появление высокопроизводительных вычислительных систем параллельной архитектуры обусловило необходимость анализа используемых в моделях алгоритмов, ранее разработанных для последовательных вычислений, с точки зрения их возможного пересмотра и наиболее эффективной параллельной реализации. С этой целью В.В. Воеводиным (1986, 1991) был предложен соответствующий математический аппарат, позволивший определять информационные ядра алгоритмов (связи между отдельными элементарными операциями) и устанавливать в них наличие или отсутствие необходимых свойств параллельности. Были построены и детально изучены различные математические модели вычислительных систем, важнейшими из которых являются конвейерный вычислитель, систолический массив и граф-машина. С помощью первой из этих моделей удалось исследовать работу конвейерных и векторных вычислительных систем и, самое главное, предложить строгие математические определения используемых на практике характеристик процессов функционирования таких систем. Вторая модель дала возможность построения так называемых систолических моделей устройств, эффективно решающих простейшие задачи. Граф-машина стала основным инструментом для изучения графов различных реализаций конкретных алгоритмов на вычислительных системах параллельной архитектуры. Обобщающее представление результатов этих исследований дано в книге В.В. Воеводина и Вл.В. Воеводина (2002), в которой с единых позиций рассматриваются суперкомпьютерные архитектуры, технологии параллельного программирования и численные методы решения математических задач.

В настоящее время для целей прогнозирования погоды используются фактически те же модели, что и для воспроизведения климата. Надежно установлено, что предвычисление отдельных особенностей погоды возможно лишь на сравнительно небольшие сроки (до двух недель), что обусловлено ограниченной предсказуемостью атмосферных процессов. Большое значение имеет анализ так называемых систематических ошибок прогностической модели (Бенгтсон, 1988), которые выявляются (месячным) осреднением большого числа прогнозов при их сравнении с фактически наблюдавшимися распределениями метеорологических характеристик. Эти ошибки растут по мере увеличения заблаговременности и оказываются аналогичными ошибкам воспроизведения климата данной моделью. Таким образом, совершенствование климатических моделей (наряду с развитием технологий подготовки начальных данных) существенным образом определяет и прогресс в прогнозировании погоды.

Процесс создания глобальных климатических моделей происходит повсеместно. Этот “параллелизм” необходим для контроля воспроизводимости получаемых с их помощью результатов. Обоснование необходимости такого параллелизма также следует из того, что обработка результатов численных экспериментов по воспроизведению современного климата в рамках международных программ показала: основные климатические характеристики, полученные с помощью различных моделей и затем усредненные по всему набору моделей, оказываются ближе к реально наблюдаемым, чем характеристики, полученные с помощью отдельных, даже лучших, моделей.

В рамках международных программ AMIP (Atmospheric Model Intercomparison Project), CMIP (Coupled Model Intercomparison Project) и др., описание и результаты которых можно найти в Интернете (см. <http://www-pcmdi.llnl.gov>), было проведено целенаправленное сравнение моделей, разработанных различными группами исследователей в разных странах мира, как между собой, так и с данными наблюдений

(Covey et al., 2000). Это дало возможность исследовать систематические ошибки в воспроизведении современного климата и оценить диапазон возможных его изменений, обусловленных, например, антропогенными воздействиями. В России, в частности, такого рода климатические модели разрабатываются в Институте вычислительной математики РАН (ИВМ РАН) и Главной геофизической обсерватории (Мелешко и др., 2002). Созданная в Институте физики атмосферы РАН совместная модель атмосферы и океана (Мохов и др., 2002) для исследования долгопериодной изменчивости климата относится к классу так называемых моделей промежуточной сложности (Claussen et al., 2002). Следует заметить, что в ходе проведения численных экспериментов с современными глобальными климатическими моделями генерируется большой объем данных, что требует специальных усилий по их визуализации, обработке и анализу.

В данной работе делается попытка с единых позиций описать базовые основы построения математических моделей разномасштабных процессов, протекающих в климатической системе: от физической постановки и ее математической формулировки до вычислительной технологии с реализацией на современных суперкомпьютерах. В качестве иллюстрации изложенных в книге подходов рассматриваются: задача моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации, проблема вихреразрешающего воспроизведения динамики геофизических пограничных слоев, задача моделирования региональных особенностей атмосферной циркуляции, проблема воспроизведения современного климата и оценки возможных в будущем его изменений.

ГЛАВА 1

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВА ИССЛЕДОВАНИЯ КЛИМАТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Климатическую систему можно описать конечным множеством параметров (компоненты скорости ветра и течений в океане, температура и соленость, водяной пар, концентрация газовых составляющих, плотность, давление и др.), значения которых в фиксированный момент времени определяют ее состояние. Эта система – глобальна, поскольку ее состояния характеризуются пространственными неоднородностями с масштабами от планетарных (порядка 10^4 км по горизонтали и порядка $10^1 - 10^2$ км по вертикали) до размеров мельчайших турбулентных неоднородностей в атмосфере и океане, элементов растительности и структурных неоднородностей почвы, а временные масштабы энергетически значимых физических процессов лежат в диапазоне от минут до десятков, сотен и тысяч лет.

Математически климат определяется как статистический ансамбль состояний, принимаемый климатической системой за достаточно большой интервал времени, который удобно выбрать очень большим (в пределе бесконечным). В этом случае собственная (внутренняя) изменчивость климата отсутствует и можно лишь говорить об изменениях климата под влиянием внешних воздействий на климатическую систему. В общем случае, под ансамблем понимается не только множество состояний, но и некоторая вероятностная мера, заданная на этом множестве и определяющая вероятность того, что система может находиться на некотором подмножестве данного множества (Дымников и Филатов, 1990). В практических приложениях часто под климатом понимаются некоторые характеристики части траектории климатической системы, проходимой ею за определенный промежуток времени ~ 30 лет. При этом для изучения климата реальной климатической системы в наличии имеется лишь ограниченный набор параметров траектории системы протяженностью в несколько десятков лет, в течение которых проводились достаточно полные натурные измерения.

Геофизические проблемы в отличие от классических проблем физики имеют одну отличительную особенность: они не допускают прямого физического эксперимента. Более того, в силу специфических особенностей климатической системы адекватные лабораторные эксперименты, как правило, также представляются весьма проблематичными. Действительно, с точки зрения рассмотрения, например, крупномасштабных атмосферных процессов атмосфера есть тонкая пленка с отношением вертикального масштаба к горизонтальному $H/L \sim 10^{-3}$. На этих масштабах климатическую систему можно считать квазидвумерной, однако, вертикальная стратификация по плотности очень важна и крупномасштабные вертикальные движения ответственны за бароклинные¹ преобразования энергии. В то же время, турбулентность и такие локальные явления как смерчи или торнадо являются существенно трехмерными.

Все перечисленное позволяет сделать вывод, что важнейшим средством изучения как климатической системы, в целом, так и протекающих в ней отдельных геофизических процессов, является математическое (численное) моделирование, базирующееся на иерархии моделей: от глобальных, основу которых составляют модели общей циркуляции атмосферы и океана, до микромасштабных моделей турбулентности.

Разработка таких моделей требует проведения натурных экспериментов, анализ результатов которых позволяет формулировать все более точные модели конкретных физических процессов, определяющих динамику климатической системы. Важно подчеркнуть, что каждая современная модель конкретного физического явления есть отражение современного его понимания. Не исключением в этом смысле являются и

¹ Жидкость называется баротропной, если ее плотность зависит лишь от давления, и бароклинной в противном случае.

геофизические модели, включающие в себя описание большого числа разнообразных физических процессов и их взаимодействий. Эти модели базируются на нелинейных уравнениях в частных производных, решения которых в общем случае можно найти лишь приближенно, заменив исходную дифференциальную задачу некоторым конечномерным аналогом и применив аппарат вычислительной математики.

1.1. Основные компоненты климатической системы и их взаимодействия

На рис. 1.1.1, который можно рассматривать как «блок-схему» современных климатических моделей, представлены элементы климатической системы, а также основные процессы и взаимодействия, происходящие в ней.

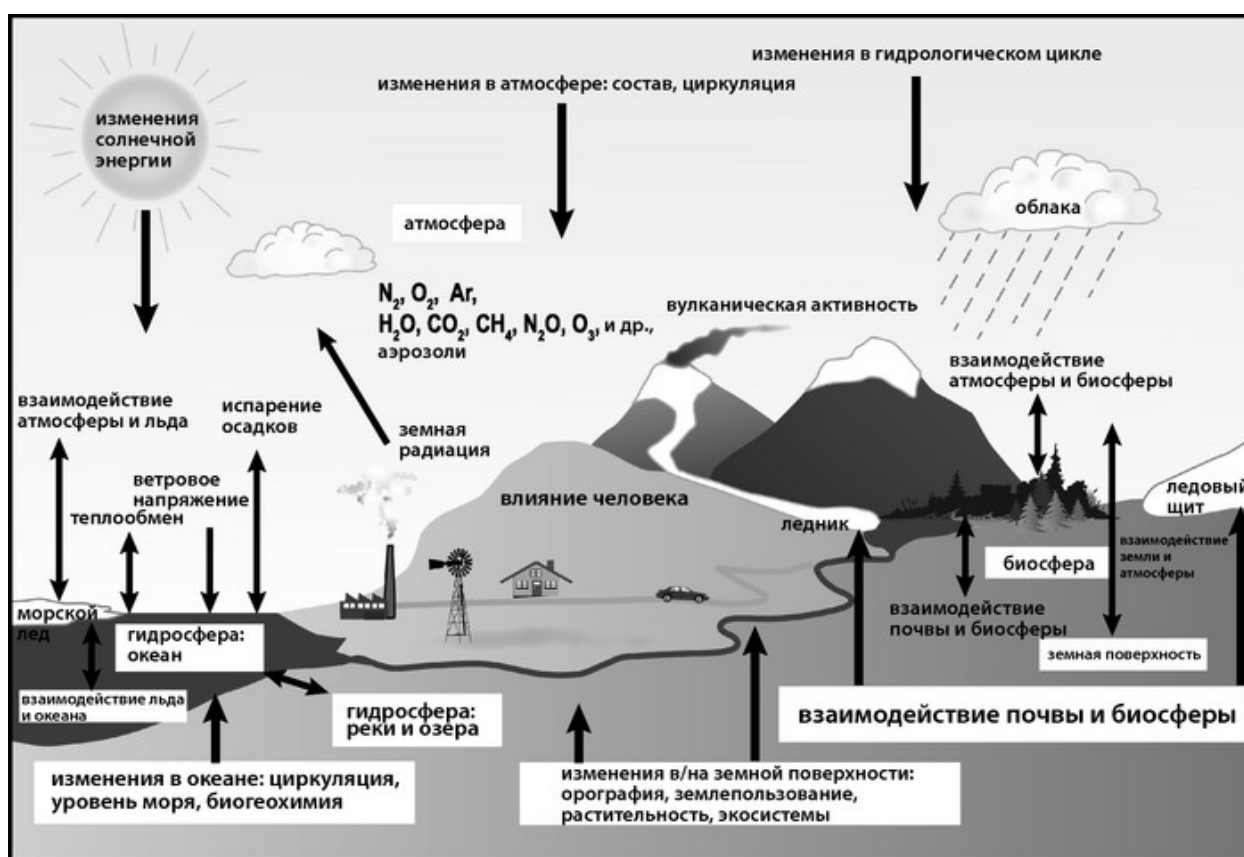


Рис. 1.1.1. Схематическое изображение компонентов климатической системы, их взаимодействий и основных процессов (IPCC, 2007).

Атмосфера Земли имеет по высоте слоистую структуру и характеризуется тем, что с увеличением высоты давление и плотность воздуха уменьшаются. Экзосфера – наиболее удаленный от земной поверхности слой атмосферы, который простирается от экзопазы (~ 600 км) до космоса (верхняя граница атмосферы) и состоит, главным образом, из водорода и гелия. Это сильно разреженная среда, где отдельные частицы проходят сотни километров, не сталкиваясь друг с другом. Эти свободно движущиеся частицы следуют по баллистическим траекториям и могут мигрировать из магнитосферы или солнечного ветра в экзосферу и обратно.

Термосфера представляет собой слой, в котором температура резко увеличивается с высотой от мезопазы (~ 90 км), а выше 300 км остается примерно постоянной. Инверсия температурного профиля в термосфере является результатом чрезвычайно низкой плотности молекул и интенсивного поглощения солнечного излучения. Температура этого

слоя может повышаться до 1500 °С, однако приближение сплошной среды здесь плохо применимо, причем и температуру среды трудно определить. Из-за относительной нерегулярности молекулярных столкновений воздух выше мезопаузы плохо перемешан, в то время как состав воздуха ниже мезосферы является достаточно однородным.

Мезосфера простирается от стратопазы до высоты 80–85 км. Температура уменьшается с высотой, ее минимум является самой холодной областью в атмосфере и имеет среднюю температуру приблизительно -85 °С.

Стратосфера представляет собой слой от тропопаузы до высоты приблизительно 51 км. Температура растет с высотой из-за сильного поглощения ультрафиолетового излучения озоновым слоем.

Тропосфера расположена от поверхности Земли и до высоты тропопаузы (между 8 км на полюсах и 18 км на экваторе). Она нагревается, главным образом, от поверхности и содержит примерно 80% массы атмосферы. Основным источником энергии – поток солнечного излучения, падающий на верхнюю границу атмосферы, плотность которого равна в среднем $I_0 = 1368 \text{ Вт/м}^2$.

В атмосфере в качестве неадиабатических источников выделяются радиационные и фазовые притоки тепла. Радиационный приток тепла к некоторому объему воздуха определяется двумя процессами: (1) поглощением солнечной радиации (нагревание) имеющимся в данном объеме количеством водяного пара, озона, углекислого газа, аэрозоля и других радиационно активных составляющих воздуха и (2) собственным тепловым излучением (выхолаживание) выделенного объема в длинноволновой части спектра, где происходит также и поглощение аналогичного излучения окружающих частей воздуха, облаков и подстилающей поверхности. Важной характеристикой радиационных процессов в системе атмосфера – Земля является величина солнечной радиации, поглощенной поверхностным слоем суши, океана и криосферы. Количество этой радиации зависит от облачности и альбедо подстилающей поверхности, а также от свойств растительности. Вместе с нисходящим потоком длинноволновой радиации у поверхности Земли, поглощенная солнечная радиация по существу определяет температуру поверхности раздела различных сред, входящих в климатическую систему, и тем самым, на их термодинамический режим.

Другим существенным процессом, воздействующим на температуру поверхности, является испарение морской воды, влаги, содержащейся в почве и растительности, а также рек, болот и внутренних водоемов. В процессе переноса от подстилающей поверхности в верхние слои тропосферы водяной пар конденсируется, нагревая атмосферу. Тепло, выделяемое в низких широтах при конденсации в случае кучевой конвекции, является главным источником нагревания, создающим (вместе с радиационным стоком тепла в высоких широтах) градиент температуры между экватором и полюсом. Облачность и осадки, формирующиеся в результате реализации процессов фазовых переходов влаги в атмосфере, воздействуют как на ее тепловой режим, так и на характеристики состояния подстилающей поверхности (в частности, на формирование снежного покрова).

Океан служит для атмосферы практически неограниченным источником водяного пара, который вместе с образующейся из него облачностью является основным регулятором радиационных потоков и притоков тепла. Скрытое тепло конденсации (особенно в низких широтах) также представляет собой один из основных источников, за счет которых формируется общая циркуляция атмосферы. Большая термическая инерция океана приводит к существенному уменьшению амплитуды годового хода температуры атмосферы (Монин и Шишков, 1979) и климат атмосферы при наличии океанов становится более мягким. Географическое распределение океанов и континентов (особенно в Северном полушарии) также по существу определяет географию региональных климатов.

Термическая неоднородность поверхности океана и суши в сочетании с орографией порождает зимой квазистационарные волны с хорошо известными центрами действия

(Блинова, 1943, Smagorinsky, 1953), а летом – циркуляцию муссонного типа. Океан также определяет географию источников нагревания атмосферы: в низких широтах поток тепла зависит в основном от поглощенной океаном прямой солнечной радиации, а в средних широтах – от характеристик сухого (и зимой холодного) континентального воздуха. Именно в средних широтах северного полушария зимой максимум источников нагревания формируется вдоль восточных берегов континентов, где сухой холодный континентальный воздух выходит на теплый океан, определяя потоки скрытого и явного тепла в атмосфере. В связи с этим можно выделить климатические энергоактивные зоны Мирового океана как зоны, где наблюдается в среднем максимальная отдача тепла океаном в атмосферу. В средних широтах северного полушария эти зоны связаны с теплыми океанскими течениями – Гольфстримом в Северной Атлантике и Кuroсио в северной части Тихого океана (Будыко, 1956).

Климат атмосферы существенно зависит от переноса тепла к полюсу океанскими течениями. Известно (Oort and von der Naag, 1976), что океан в среднем переносит тепла к полюсам примерно столько же, сколько и атмосфера, причем в низких широтах Северного полушария основной перенос тепла к полюсу осуществляется именно океаном. Этот перенос в значительной степени определяет долгопериодные изменения климата атмосферы. Если обратиться, например, к проблеме изменения климата за счет увеличения концентрации углекислого газа в атмосфере, то результаты численных экспериментов с совместными моделями атмосферы и океана (см., например, Covey et al., 2000, Дианский и Володин, 2002) свидетельствуют о том, что отклик атмосферы на такие изменения географически неоднороден, а его максимальные значения наблюдаются зимой в высоких широтах. Величина этого отклика определяется различными причинами: изменением альбедо земной поверхности за счет таяния льда и перемещения границы снежного покрова, дополнительным потоком водяного пара из средних широт в высокие, добавочным потоком тепла из океана через лед в атмосферу в высоких широтах, а также непосредственно потоком тепла, переносимым атмосферой и океаном к полюсам. Тепловая инерция океана является ключевым фактором в определении времени установления квазиравновесного состояния климатической системы при изменившейся (например, удвоенной) атмосферной концентрации углекислого газа.

Основная часть крупномасштабных движений в океане формируется под влиянием атмосферных процессов различных временных и пространственных масштабов. Их альтернативой могут служить лишь отдельные явления, такие как приливные волны, вызываемые силами притяжения небесных тел; процессы распреснения, обусловленные поступлением речной воды; уединенные волны типа цунами, возникающие в результате действия источника на дне океана (вулканического или тектонического происхождения); вертикальные движения под влиянием геотермальных потоков на дне океана.

Течения в океане обусловлены как термодинамическим, так и механическим воздействием атмосферных процессов. Существенные внутренние источники тепла в океане отсутствуют, но соленость в значительной степени определяет плотность морской воды, а значит, и циркуляцию океанских вод. Если говорить об особенностях квазистационарных (климатических) режимов океана, то в первую очередь следует обратить внимание на процессы формирования его главного термоклина, макроциркуляционных систем и меридионального теплообмена. К числу внешних факторов, вызывающих течения в глубинах океана, следует отнести воздействие процессов в экмановском слое трения, формирующих вертикальные токи на его нижней границе, и термохалинное взаимодействие, обусловленное двумя основными причинами: пространственным распределением потоков тепла и соли на поверхности и процессами глубокой конвекции, ответственными за образование холодных глубинных вод океана.

Можно выделить два типа такой конвекции: охлаждение в шельфовой зоне с опусканием плотной воды вдоль континентального склона и конвекция в открытом океане. Наиболее интересная шельфовая конвекция наблюдается в районах Гренландии и

Антарктиды. Предполагается, что такого рода конвекция развивается в зимнее время за счет **льдообразования** и, таким образом, осолонения вод (обычно соленость льда на 30% меньше солености морской воды). Кроме того, формирование донных антарктических вод связывают с осолонением в полыньях в зимнее время вблизи ледника (Gill, 1979).

Самым ярким примером крупномасштабного взаимодействия атмосферы и океана в низких широтах является Эль-Ниньо (выход теплых вод у берегов Перу) и Южное колебание (с периодами 3–7 лет), в качестве индекса которого традиционно принимается разность приземного давления между метеостанциями, расположенными в Дарвине (Австралия) и на Таити. Было установлено (см., например, Bjerknes, 1969), что явление Эль-Ниньо и Южное колебание сильно коррелируют между собой: существует статистически значимая связь между эволюцией Эль-Ниньо и динамикой атмосферных процессов в экваториальной области Тихого океана. В цитированной работе Бьеркнеса показано, что теплая аномалия поверхности экваториальной части Тихого океана приводит к возникновению влажной конвекции и конвергенции в нижней части атмосферы, что, в свою очередь, вызывает ослабление пассатных ветров. Поскольку именно пассаты генерируют интенсивный апвеллинг (выход на поверхность) холодной воды, то их ослабление является причиной ослабления также апвеллинга. Редуцированное поступление холодной воды к поверхности поддерживает положительную обратную связь с первоначальной теплой аномалией температуры поверхности океана, усиливая ее. Эта аномалия распространяется в западном направлении – от берегов Южной Америки в центр экваториальной области Тихого океана.

Процессы, протекающие в климатической системе, характеризуются обратными связями между различными параметрами ее состояния. Механизмы обратной связи могут либо усиливать аномалии одного из взаимодействующих параметров (положительная обратная связь), либо ослаблять их (отрицательная обратная связь). В качестве примера положительной обратной связи можно рассмотреть взаимодействие между **снежным покровом** и радиацией. Зимой снег на подстилающей поверхности отражает почти всю приходящую солнечную радиацию, что приводит к постоянному ее охлаждению. При таянии части снежного покрова альбедо уменьшается и усилившееся поглощение солнечной радиации земной поверхностью или водой способствует таянию снега. Обратная связь облачность – радиация представляет собой пример отрицательной обратной связи. Повышение температуры поверхности влажной суши приводит к росту содержания водяного пара и к увеличению облачности, которое уменьшает количество солнечной радиации, достигающей поверхности, и к понижению ее температуры. Правда, в этом случае имеется также некоторая положительная обратная связь, обусловленная поглощением облаками длинноволнового излучения Земли.

Другой пример связан с аномалией в поле температуры поверхности океана, которая модифицирует процессы турбулентного обмена между приповерхностным слоем атмосферы и верхним слоем океана, приводя к изменениям состояния как атмосферной (в частности, за счет радиации), так и океанической (например, вследствие ветрового перемешивания) составляющих климатической системы. Эти изменения воздействуют, в свою очередь, на температуру поверхности океана, в результате чего ее первоначальная аномалия может либо усилиться, либо уменьшиться. Здесь имеет место неопределенность чисто качественных рассуждений, преодолеть которую можно только с помощью количественного исследования на основе моделирования. Поскольку реальная климатическая система не проявляла ранее и не проявляет теперь поведения типа «цепной реакции», то любая положительная обратная связь в цепочке такого рода изменений должна рано или поздно компенсироваться взаимодействием других внутренних процессов адаптации, установить которые можно опять же с помощью модели.

Согласно 4-му отчету МГЭИК (IPCC, 2007), к концу XXI века в Арктике потепление может составить (в среднем по всем рассматриваемым климатическим моделям) от 4–5 градусов при самом благоприятном сценарии до 7–10 градусов при самом

жестком. Потепление в Арктике согласно моделям в 2–5 раз превышает повышение температуры в целом по Земле. Причинами такой чувствительности Арктики к глобальному потеплению считаются локальные положительно обратные связи температуры и альбедо, температуры и радиационного эффекта от водяного пара, а также отсутствие глубокой конвекции, которая приводила бы к распределению потепления во всей тропосфере.

Обратные связи между процессами в верхнем (деятельном) слое **суши** и атмосфере играют большую роль в климатической системе. В средних и высоких широтах термодинамическое влияние почвы сравнимо с тем, что проявляет океан. В то время как океан аккумулирует солнечную энергию летом и отдает накопленное тепло атмосфере зимой, почва накапливает осадки зимой с тем, чтобы снабжать атмосферу влагой летом и охлаждать ее (Schär et al., 1999). Таким образом, возникает эффект долговременной памяти с масштабом в несколько месяцев. Особый интерес представляет процесс, в результате которого увеличение эвапотранспирации (испарения растительностью) прямым или косвенным образом усиливает осадки (на масштабах в несколько сотен километров).

В работе (Schär et al., 1999) проведены численные эксперименты с региональной моделью климата (регион – Европа и Северная Атлантика) с целью исследовать чувствительность климатического режима летних осадков над Европой по отношению к (континентального масштаба) содержанию влаги в почве. В контрольном эксперименте были использованы данные оперативных анализов Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды для июля 1990 и июля 1993 гг. Два эксперимента по чувствительности предполагали "сухие" и "влажные" начальные условия для влажности почвы, соответственно. Было установлено, что более интенсивные осадки над влажной (по сравнению с сухой) почвой обусловлены, в основном, атмосферной адвекцией, а уж затем влажная почва усиливает эффективность процесса конвективных осадков. Ключевые элементы этой обратной связи таковы. Прежде всего необходимо отметить, что влажная почва обуславливает развитие сравнительно тонкого пограничного слоя. В результате притоки тепла и влаги оказываются сосредоточенными в относительно малом объеме воздуха, что приводит к формированию источника конвективной неустойчивости и к ее реализации. Наконец, суммарная коротковолновая радиация, поглощенная почвой, уменьшается во "влажном" эксперименте (в результате повышенной облачности), но это эффект компенсируется уменьшением суммарного длинноволнового излучения (в результате возросшего парникового эффекта водяного пара и облачного рассеяния). В результате суммарный радиационный поток оказывается больше, чем в "сухом" эксперименте, увеличивая приток влажной энтропии к пограничному слою. Все эти три процесса действуют совместно, усиливая конвективную активность.

Вечная мерзлота определяется как подповерхностный слой суши, температура которого остается ниже 0 °С в течение двух последовательных лет и дольше. Она образуется в результате весьма тонких процессов, которые зависят от баланса тепла поверхности Земли, геотермального потока тепла, содержания воды в почве и ее термических свойств. Современное распространение сплошной и пятнистой мерзлоты не похоже на поля каких-либо иных физико-географических, геологических, ботанических и климатических характеристик. В частности, отсутствует тесная взаимосвязь между вечной мерзлотой и средними климатическими показателями (Унтерштейнер, 1987). Так например, на Аляске южная граница многолетней мерзлоты проходит к северу от положения среднегодовой изотермы -6 – -8 °С, в Канаде - к северу от изотермы -8.5 °С, а в России - к северу от изотермы -7 °С. Возможно, что наиболее важная связь между вечной мерзлотой и климатом состоит в том, что вечная мерзлота препятствует подпитыванию и движению подземных вод, сдерживает развитие растительности и увеличивает поверхностный сток. Она реагирует на изменения климата, но эта реакция столь сложна и неоднозначна, что с трудом поддается прогнозу. Наиболее крупные реки Сибири Енисей и

Лена протекают, в основном, по сплошной и пятнистой мерзлоте и большая амплитуда их стока может быть объяснена невозможностью его ослабления за счет "сброса" в грунтовые воды. В результате, мощные потоки пресной воды втекают в Карское море и море Лаптевых, что существенно влияет на их термодинамический режим, процессы формирования льда и региональный климат.

В районах вечной мерзлоты обмен массой между атмосферой и сушей в холодный период года пренебрежимо мал. Летом же потоки водяного пара и других газов (в основном, метана и углекислого газа) формируются за счет относительно неглубокого приповерхностного слоя сезонного оттаивания - активного слоя. Чем мощнее активный слой, тем больший объем вещества доступен для обмена с атмосферой. Динамика активного слоя зависит от его влагосодержания, растительного покрова, толщины снежного покрова в зимний период и других факторов.

Общепризнано, что потепление климата вследствие повышения концентрации парниковых газов в атмосфере наиболее ярко выражено в полярных областях Северного полушария. Это потепление может привести к увеличению глубины сезонного протаивания, прямо воздействуя на химические и биологические процессы в Арктической тундре. Наибольшие концентрации и амплитуды сезонных вариаций CO_2 и CH_4 наблюдаются на $60^0\text{--}70^0$ с.ш. (Семилетов, 1996). Большая часть территории России находится в зоне вечной мерзлоты, оттаивание которой при нарастающем воздействии антропогенных факторов может вызвать серьезные последствия: расконсервация менее 0.1% количества органического углерода, захороненного в верхнем 100-метровом слое мерзлоты (примерно 10^4 Гт углерода в форме CH_4) может привести к удвоению содержания атмосферного метана, радиационная активность которого примерно в 20 раз выше, чем у CO_2 . Это может привести к еще большему потеплению, а значит, и к ускорению таяния мерзлоты (реализуется механизм положительной обратной связи, способный многократно усилить глобальное потепление). В результате, значительным может оказаться ущерб от повреждений социальной инфраструктуры (дороги, здания, линии электропередач, газо- и нефтепроводы и т.д.).

Биосфера является важным компонентом климатической системы. Процессы эвапотранспирации, зависимость шероховатости и альbedo подстилающей поверхности от типов растительности, фотосинтез и газовый обмен между атмосферой и растениями – все это влияет на долгопериодные изменения климата атмосферы. В свою очередь, динамика и глобальное распределение растительности в определяющей степени зависит от характеристик климата. Экстремальные погодно-климатические явления (засухи, наводнения, ураганы и тайфуны, лесные пожары и т.д.) являются основными источниками экосистемных возмущений, проявляющихся в изменении как структуры экосистемы (компоненты растительности и плотность их расположения), так и ее функциональных атрибутов (Parmesan et al., 2000).

Растительность присутствует почти всюду, за исключением областей, занятых пустынями. В лесах высота деревьев может достигать десятков метров, а их корни могут распространяться в почву на несколько метров, что определяет специфику турбулентного переноса в приземном слое атмосферы и тепловлагообмена в почве. В частности, влагоемкость почвы по существу зависит от запасаемой растительностью количества влаги, а значит, и от вида биомов.

Альbedo поверхности суши значительно изменяется в пространстве и времени (Кондратьев, 1966). Альbedo растительного покрова в высоких широтах (14% для бесснежного хвойного леса) меньше, чем в низких (24% для саванны). Альbedo почвы, не покрытой растительностью, в сухих условиях больше, чем во влажных (для чернозема – 14% и 8%, соответственно). Зимой альbedo леса (45% при наличии устойчивого снежного покрова) значительно меньше, чем альbedo открытого заснеженного поля (70–80%). Поскольку леса существенно снижают альbedo снежного покрова, то это является основной причиной «радиационной» обратной связи между растительностью и

температурой приземного воздуха. Эта связь проявляется следующим образом: (1) чем больше занимаемая растительностью площадь, тем меньше альbedo заснеженной поверхности, что (2) приводит к повышению температуры и раннему снеготаянию, обуславливающим (3) более длительный и теплый сезон роста, а, значит, и (4) увеличение площади, занимаемой растительностью. Эта положительная обратная связь несколько компенсируется отрицательной «гидрологической» связью, заключающейся в следующем. В сезон роста деревья имеют более плотную и продуктивную крону, чем кустарники и мох, и, следовательно, (1) процессы транспирации влаги протекают более интенсивно, что (2) приводит к большему по сравнению с тундрой потоку скрытого тепла и (3) к выхолаживанию лесного приземного воздуха. В среднегодовом выражении, гидрологическая отрицательная обратная связь вторична по отношению к радиационной положительной связи (Brovkin et al., 2003).

Следуя Болину (1987), процесс фотосинтеза, для осуществления которого растениям требуется энергия (солнечная или рассеянная радиация), вода, углекислый газ и питательные вещества, может быть описан следующим образом. Вода необходима для переноса питательных веществ, а также для поддержки биохимических процессов. Устьица, через которые углекислый газ и некоторые газообразные питательные вещества поступают внутрь растения, открываются и закрываются в зависимости от количества приходящей коротковолновой радиации и внутреннего влагозапаса. Фотосинтез происходит с максимальной скоростью в раннее время суток, когда растение близко к насыщению и органические продукты быстро переносятся от места фотосинтеза вовнутрь растения. Имеется регулирующий механизм: во время процесса ассимиляции вода испаряется через открытые устьица, причем если эти потери превышают количество влаги, поступающей от корней, то устьица частично закрываются. Если щель становится достаточно узкой, то скорость диффузии углекислого газа понижается, а интенсивность фотосинтеза уменьшается.

Экосистемы суши содержат в 3–4 раза больше углерода (в виде запасенного в почве и растительности органического вещества), чем общее содержание атмосферного CO_2 , причем примерно 12% этого содержания участвует в обмене с экосистемами через биологические процессы фотосинтеза и дыхания (Lashof et al., 1997). Время круговорота углерода в атмосфере составляет 12–15 лет, а в лесах варьирует от 20–30 лет (тропические леса) до 100 лет в тайге. В почвах две трети первичной продукции (разности между фотосинтезом и дыханием) содержится в форме листьев, хвои, травы и тонких корней (т.н. опад), которые отмирают и разлагаются в течение нескольких лет. В северных широтах время круговорота углерода в подзолистых почвах и почвах торфяных болот может составлять 1000 лет и более, а в тропических почвах – менее 100 лет (Болин, 1987). Все изложенное свидетельствует о том, что при рассмотрении изменений климата на временных масштабах 100 лет и более экосистемы нельзя считать статичными. Необходимо исследовать как характеристики их отклика на внешнее воздействие, так и механизмы обратных связей. Ожидается, что наблюдаемое в настоящее время глобальное потепление может оказать большое влияние на северные леса. Результаты экспериментов с климатическими моделями (см., например, Rizzo and Wilken, 1992) показали, что сейчас граница лесной растительности сдвигается к северу значительно быстрее, чем это имело место в условиях более ранних климатических флуктуаций.

Цикл углерода в почвах естественных экосистем (рис. 1.1.2) на масштабах времени, сравнимых с антропогенными изменениями климата, контролируется, в основном, почвенными микроорганизмами, которые играют центральную роль в разложении органического вещества (Lashof et al., 1997). Этот процесс зависит как от температуры, так и влажности почвы. В целом, повышение температуры ускоряет скорости химических реакций, а эффект изменений влаги зависит от того, в каком из трех режимов она находится. При низких значениях почвенной влаги почвенная респирация усиливается с ростом поступления влаги. В широком промежуточном диапазоне увеличившееся

количество почвенной влаги оказывает слабое воздействие на анаэробные процессы. Наконец, в условиях насыщения и избыточного увлажнения способность к окислению ограничена и процессы разложения органического вещества существенно замедляются. Для широкого класса экосистем установлена хорошая корреляция между климатическими условиями и скоростью почвенной респирации: с ростом температуры и влажности скорость респирации также возрастает. Это означает, что глобальное потепление может привести к существенной потере почвенных запасов углерода (см., например, Raich and Schlesinger, 1992).

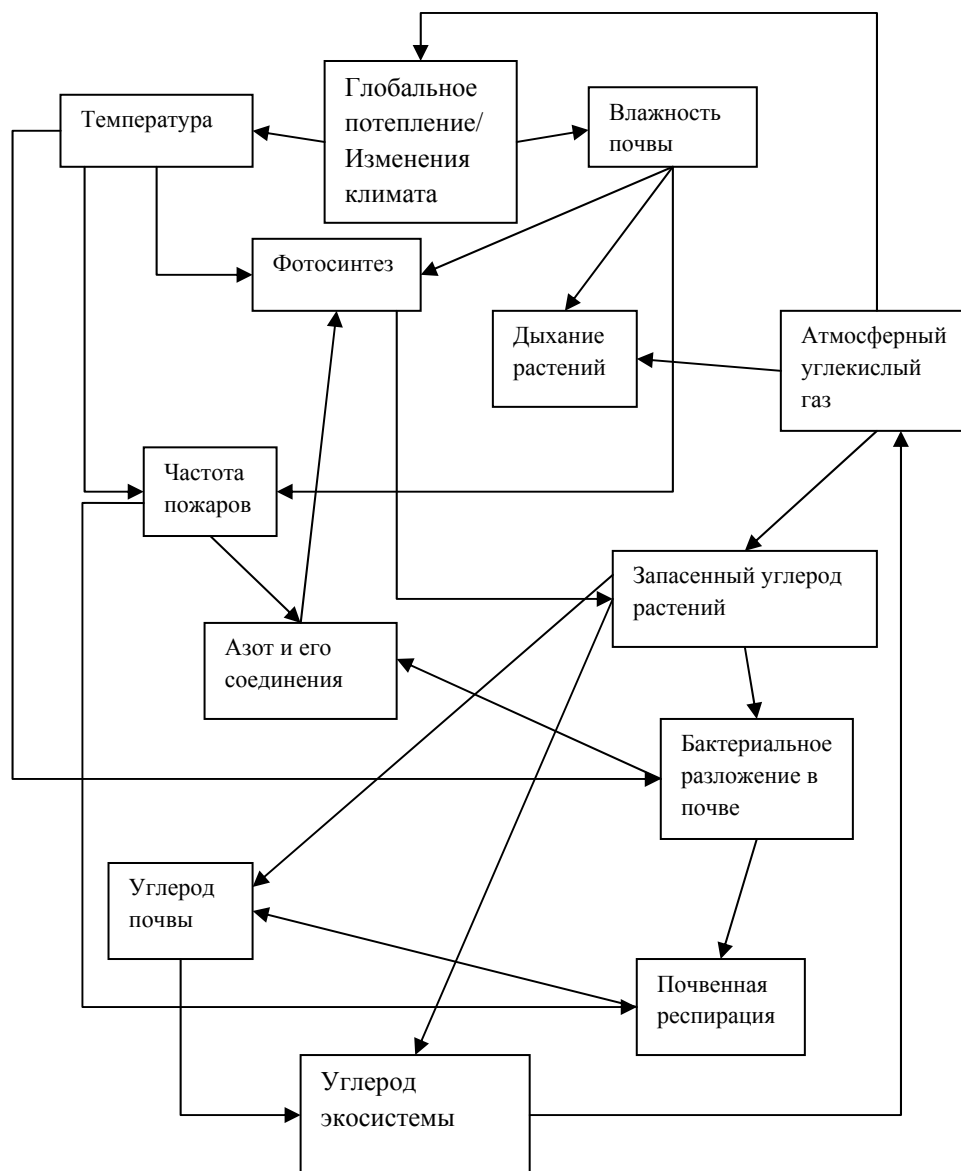


Рис. 1.1.2. Возможные климатические обратные связи в гипотетической экосистеме (по Lashof et al., 1997).

Метан является вторым по значимости (после CO_2) парниковым газом. Его эмиссия обусловлена, в основном, биологическими источниками: анаэробное разложение органического вещества в болотах, рисовых полях и т.п. ответственно примерно за 40% поступления метана в атмосферу (Prather et al., 1995). В северных широтах основным круглогодичным региональным источником поступления CH_4 в атмосферу являются подозерные талики, где в анаэробных условиях также происходит процесс деструкции ранее законсервированного органического вещества (Семилетов, 1996). Изменения в скорости окисления метана атмосферными гидроксилами (OH) и биологического

окисления играют важную роль в глобальном бюджете метана. Температура и влажность почвы (рис. 1.1.3) являются ключевыми параметрами, контролирующими продукцию и поступление метана в атмосферу: при температурах ниже 10 °С производство метана практически отсутствует, а влажность почвы лимитирует диффузию кислорода и метана в почвенных порах (Bubier et al., 1995). Оказывая воздействия на потребление метана, изменения в содержании почвенной влаги могут приводить как к положительным, так и отрицательным обратным связям. В то же время с потеплением связана положительная обратная связь, поскольку производство метана растет быстрее, чем его потребление. Суммарный же эффект будет зависеть от поверхностной гидрологии, поскольку обусловленный нагреванием рост продукции метана может не привести к увеличению его эмиссии, если произойдет понижение грунтовых вод и окисление метана (Lashof et al., 1997).

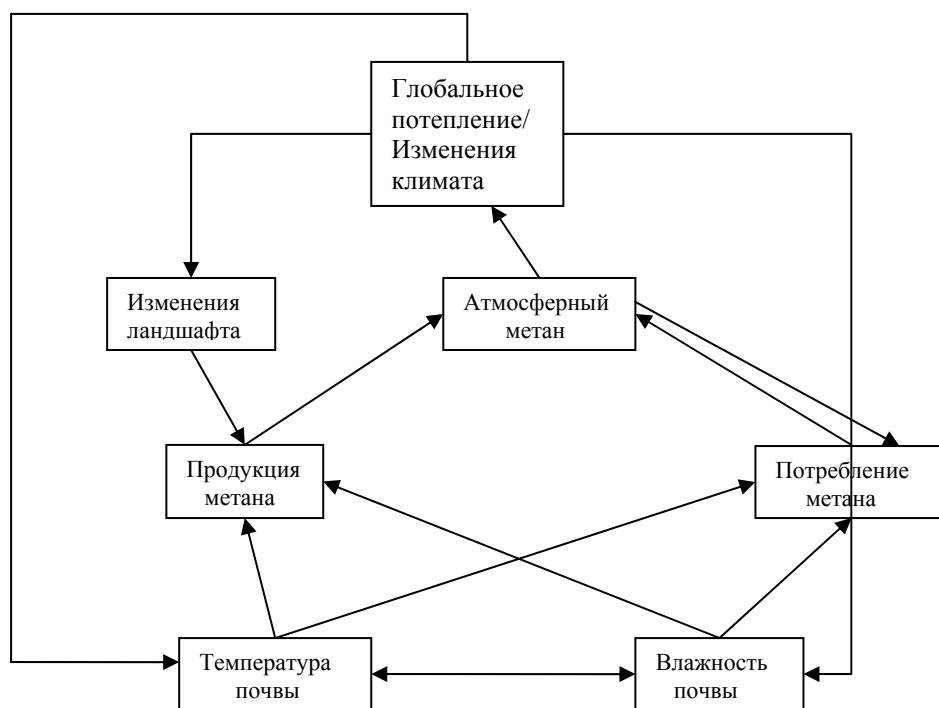


Рис 1.1.3. Метанозависимые обратные связи (по Lashof, 1997).

В работе (Bubier et al., 1995) показано, что эмиссия метана сильно зависит от растительного покрова и топографических особенностей, в частности, большие значения эмиссии были найдены в переходных зонах между вечной мерзлотой и болотными системами. На перенос метана из анаэробных слоев в атмосферу оказывают влияние как растительность (с ее корневой системой, представляющей потенциальный источник органического вещества), так и гидрологические процессы. Представляется весьма вероятным, что деградация вечной мерзлоты может более чем вдвое увеличить эмиссию метана из расположенных в высоких широтах болот, которая (в зависимости от изменений во влажности почвы) может составить от 5 до 65 Мт CH_4 в год (Hogan, 1993).

Известно (Монин и Яглом, 1965), что все движения, происходящие в жидкостях и газах, можно разделить на два, резко отличающихся между собой, типа: гладкие течения, которые называют *ламинарными*, и их противоположность – *турбулентные* течения, характеристики которых (скорость, давление, температура и другие гидродинамические величины) беспорядочно пульсируют, крайне нерегулярно изменяясь в пространстве и во времени. На рис. 1.1.4 приведены типичные записи измерений пульсаций продольной (вдоль направления основного потока) u' и вертикальной w' компонент скорости ветра, сделанных с помощью акустического анемометра в приземном слое атмосферы вблизи

заснеженной поверхности в различных метеорологических условиях (Lykossov and Wamser, 1995).

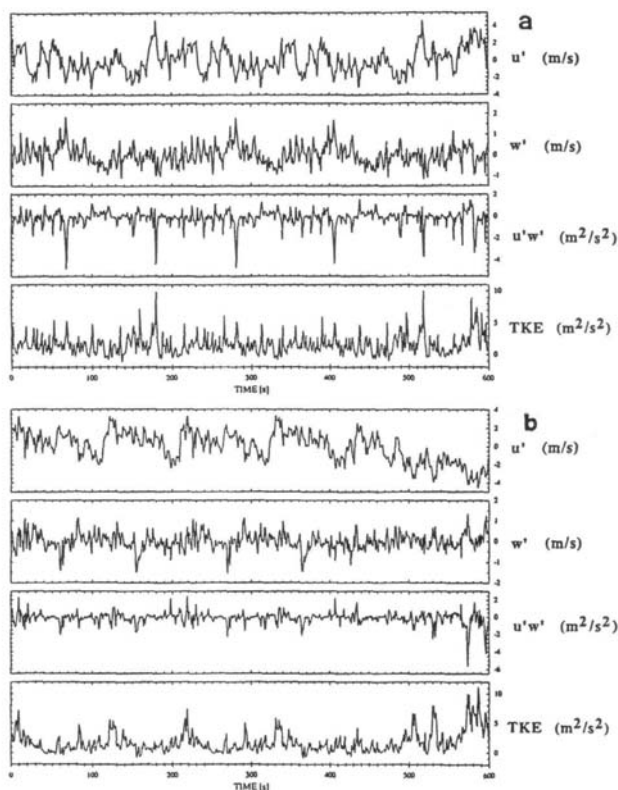


Рис. 1.1.4. Примеры временных рядов пульсаций скорости u' , w' , вертикальной компоненты потока импульса $u'w'$ и «энергии» $TKE = (u'^2 + v'^2 + w'^2) / 2$ в условиях снежной метели (а) и без нее (б).

Сложный характер изображенных на рис. 1.1.4 кривых (большое количество пульсаций различных периодов и амплитуд) свидетельствует о том, что в обоих случаях движение воздуха было турбулентным, хотя и несколько отличающимся в деталях в зависимости от метеорологической обстановки. Важным отличием турбулентного течения от ламинарного является то, что турбулентное движение обладает гораздо большей способностью к передаче импульса, тепла и пассивных примесей (в частности, взвешенных частиц естественного происхождения – пыли, песка и снега), к распространению химических реакций, в том числе горения при лесных пожарах. Наконец, поскольку турбулентные течения характеризуются существенными внутренними неоднородностями, то они способны рассеивать проходящие через атмосферу и океан звуковые и электромагнитные волны, генерируя пульсации их амплитуд и фаз.

Подавляющее большинство встречающихся в природе и технике течений является турбулентным, в то время как ламинарные течения представляют собой лишь довольно редкое исключение. Атмосферная **турбулентность**, проявляющаяся в самых разнообразных формах – от конвекции в пограничном слое и до общей циркуляции планетарного масштаба, играет основную роль в процессах переноса тепла и влаги воздушными массами, в испарении влаги с поверхности почвы и водоемов, в зарождении ветровых волн на поверхности моря и образовании под воздействием ветра течений в океане, в болтанке самолетов и других летательных аппаратов и т.д.

Одним из самых ранних описаний турбулентности можно считать принадлежащее перу Леонардо да Винчи (Lumley, 1992): «Наблюдаемое течение поверхности воды напоминает двойное движение волос, одно из которых обусловлено их весом, а другое – направленностью их локонов; таким образом, в воде возникают завихренные движения,

одна часть которых обусловлена основным течением, а другая – случайными и обратными течениями». Многие физические процессы и явления нашли свое отражение в русской классической поэзии (Голицын, 2004). А.С. Пушкиным в стихотворении «Зимний вечер» (1825) дана поэтическая формулировка, выражающая две основные черты развитой турбулентности – вихревую природу и пространственно-временную перемежаемость:

*Буря мглою небо кроет,
Вихри снежные крутя;
То, как зверь, она завоет,
То заплачет, как дитя...*

Турбулентные течения характеризуются структурами с пространственными и временными масштабами, изменяющимися в широком диапазоне. Если L – масштаб длины наибольшего из движений, а l – соответствующий масштаб наименьшего из движений, то в турбулентном течении $L \gg l$. Масштаб l – это масштаб, на котором становятся важными процессы молекулярной диссипации, приводящие к потере энергии течения.

В формировании и поддержании турбулентности доминируют нелинейные процессы. В турбулентном течении движения различных масштабов взаимодействуют между собой нелинейным образом и эти нелинейные взаимодействия ответственны за присутствие структур большого количества различных масштабов. В поле невзаимодействующих линейных внутренних волн с большим числом разных частот и волновых чисел тоже наблюдается широкий диапазон масштабов длины, но он, в отличие от турбулентности, обусловлен внешними вынуждающими силами или граничными условиями.

Л. Ричардсон впервые высказал (Richardson, 1922) предположение о том, что развитая турбулентность представляет собой иерархию вихрей (неоднородностей потока) разных размеров, в которой вихри данного порядка иерархии возникают за счет потери устойчивости более крупных вихрей предыдущего порядка, получают от них энергию и, в свою очередь, теряют устойчивость, порождая более мелкие вихри следующего порядка и передавая им свою энергию. Таким образом, возникает «каскадный процесс», с помощью которого энергия крупномасштабного потока в результате реализации сдвиговой неустойчивости последовательно передается движениям все более и более мелких масштабов, достигая некоего минимального масштаба, на котором вязкость среды играет существенную роль и происходит заметная диссипация кинетической энергии в теплоту (Монин и Яглом, 1965). Соответствующую физическую картину развитой турбулентности Ричардсон описал следующим английским четверостишьем:

*Big whirls have little whirls,
which feed on their velocity.
Little whirls have lesser whirls,
and so on to viscosity.²*

Турбулентные течения, вообще говоря, не предсказуемы в пространстве и времени. Даже если были бы известны точные уравнения, описывающие эволюцию течения, ее невозможно предсказать во всех деталях в силу того, что турбулентное течение чувствительно к начальным и граничным условиям, что является результатом сильной нелинейности явления. Это – фундаментальное свойство хаотических систем. Вместе с

² Крупные завихрения рождают мелкие завихрения, питающиеся за счет их скорости; мелкие завихрения рождают еще меньшие завихрения, и так далее до начала действия вязкости.

тем, нужно различать турбулентность и хаос. Хаотические движения не обязательно принадлежат к турбулентным, поскольку хаос может реализоваться и на малом числе степеней свободы, т.е. иметь «узкий» спектр в пространстве и времени. Имеется ряд примеров хаотических систем, характеризующихся сложным поведением во времени, но простой пространственной структурой (например, система Лоренца, Lorenz, 1962).

Наконец, турбулентные течения необратимы во времени. Они имеют тенденцию забывать свои начальные условия и достигать некоторого равновесного состояния. Турбулентность способна перемешивать субстанции, но с ее помощью нельзя восстановить исходное (не перемешанное) состояние.

1.2. Базовые принципы построения геофизических моделей

Состояния климатической системы изменяются со временем и в этих изменениях можно выделить два типа составляющих (Монин, 1982). К первому из них относятся вариации со строго определенными периодами, включающими: (1) суточные колебания, обусловленные суточными изменениями инсоляции вследствие вращения Земли, (2) приливные колебания, связанные с гравитационными воздействиями Луны и Солнца на вращающуюся Землю и (3) сезонные колебания и связанные с ними муссонные эффекты, вызываемые изменениями инсоляции при движении Земли вокруг Солнца. Демонстрируя наибольшие вариации, сезонный и суточный циклы являются наиболее ярким проявлением вынужденной изменчивости климатической системы, обусловленной астрономическим фактором. Изменения в амплитуде и фазе отклика климатической системы на эти внешние воздействия можно рассматривать как индикатор изменений климата.

Второй тип изменений климатической системы со временем характеризуется интенсивными нерегулярными колебаниями, обусловленными внутренними нелинейными взаимодействиями параметров ее состояния, и включает следующие составляющие: (i) синоптические колебания с масштабами $\sim 10^3$ км и периодами в несколько суток – в атмосфере и с масштабами $\sim 10^2$ км и периодами в несколько недель – в океане, (ii) глобальные колебания с периодами от недель до месяцев, включая примерно двухнедельный цикл индекса зональной циркуляции атмосферы в средних широтах и 30–60-дневные колебания в тропиках, и (iii) межгодовые колебания с наибольшей интенсивностью в диапазоне периодов 2–5 лет, в частности, квазидвухлетние вариации зонального ветра в экваториальной атмосфере и явление Эль-Ниньо в восточной части экваториальной зоны Тихого океана.

В частности, квазидвухлетние колебания (КДК), проявляющиеся на высотах примерно 16–50 км, представляют собой медленно распространяющиеся вниз западную и восточную фазы зонального ветра, сменяющие друг друга с периодом около 28 месяцев. Основной механизм воздействия КДК на динамику атмосферы связан с модуляцией переноса волновой активности во внетропической стратосфере, что может приводить к внезапным стратосферным потеплениям и к взаимодействию КДК с другими низкочастотными процессами, например, с Эль-Ниньо (Baldwin and Dunkerton, 1998). Возникает вопрос, каким требованиям должна удовлетворять модель, чтобы КДК воспроизводились. Основная трудность решения этого вопроса заключается в реализации сложного механизма формирования КДК, связанного с нелинейным взаимодействием среднего зонального потока и вертикально распространяющихся волн различного масштаба (Кулямин и др., 2009).

Для того, чтобы описать эволюцию климатической системы с помощью соответствующих математических моделей, необходимо воспользоваться рядом принципов (Дымников и др., 2005). Принимается, что локально справедливы уравнения классической равновесной термодинамики. Учитывается также тот факт, что движения в атмосфере и Мировом океане происходят на вращающейся Земле. Предполагается, что для

описания динамики атмосферы и океана справедливы уравнения Навье-Стокса. При этом в отличие от атмосферы океан рассматривается как несжимаемая жидкость. Поскольку индивидуальное описание процессов всех масштабов от планетарного до турбулентных до сих пор практически неосуществимо (в силу вычислительных возможностей), то все неоднородности полей, характеризующих состояние климатической системы (скорость ветра в атмосфере и течений в океане, давление, температура, влажность атмосферы и почвы и т.д.), обычно рассматриваются как суперпозиция крупномасштабных, описываемых индивидуально, составляющих и мелкомасштабных, описываемых лишь статистически, компонент. При этом используются уравнения Рейнольдса (осредненные по некоторым пространственным и временным масштабам уравнения Навье-Стокса) и считается, что существует принципиальная возможность их замыкания. Это означает, что эффекты процессов подсеточных масштабов (масштабов меньших, чем масштаб осреднения) могут быть выражены через характеристики процессов крупных масштабов.

К этим процессам относятся: перенос излучения (коротковолновой и длинноволновой радиации); фазовые переходы влаги и локальное осадкообразование; конвекция; турбулентность в пограничных слоях (некоторые характеристики этих слоев описываются явно); мелкомасштабные орографические возмущения; волновое сопротивление (взаимодействие мелкомасштабных гравитационных волн с основным потоком); мелкомасштабная диссипация и диффузия; перенос тепла, влаги, метана и других газов в деятельном слое суши, в том числе, при наличии водоемов.

При достаточно большом масштабе горизонтального осреднения ($\sim 10^2$ км) справедливо приближение гидростатики: вертикальный градиент давления приближенно уравнивается силой тяжести. Использование такого приближения требует дополнительных упрощений (постоянный радиус Земли, пренебрежение составляющими силы Кориолиса с вертикальной компонентой скорости) с тем, чтобы в системе уравнений при отсутствии внешних источников энергии и диссипации выполнялся закон сохранения энергии.

Совершенно очевидно, что получить аналитические решения при произвольных начальных данных сложных нелинейных уравнений гидротермодинамики атмосферы и океана (см. раздел 1.3) практически невозможно и потому ищутся их приближенные решения с помощью разного рода конечномерных аппроксимаций. Эти аппроксимации должны строиться таким образом, чтобы при отсутствии диссипации и источников энергии выполнялся бы закон сохранения – аналог исходного закона. Этот закон сохранения автоматически приводит в данном случае к вычислительной устойчивости решения разностной задачи, если под устойчивостью понимается непрерывная зависимость нормы решения от нормы правой части и нормы начальных данных.

Так как атмосфера и океан квазидвумерны, то перенос энергии по спектру в этих средах определяется законами двумерной жидкости. Известно, что в идеальной несжимаемой двумерной жидкости имеется два квадратичных инварианта – энергия и энстрофия (квадрат завихренности). При этом распределение энергии в инерционном интервале масштабов, в котором диссипация и генерация энергии практически отсутствуют и основным процессом является передача энергии по спектру, по существу определяется переносом энстрофии в сторону высоких волновых чисел. Чтобы выполнить это условие в численной модели, необходимо строить конечномерные аналоги таким образом, чтобы в двумерной асимптотике также существовали конечномерные аналоги энергии и энстрофии, которые были бы инвариантами при отсутствии диссипации и источников.

Следует, однако, отметить, что измерения, проведенные в последние десятилетия (см., например, Gage and Nastrom, 1990), показали, что атмосфера имеет принципиальные особенности, отличающие ее эволюцию от поведения квазидвумерной жидкости. Генерация энергии в атмосфере происходит на синоптических масштабах вследствие реализации бароклиной неустойчивости. На масштабах, больших чем синоптические,

инерционный интервал отсутствует и распределение энергии по спектру на этих масштабах определяется относительным соотношением между характерным временем диссипации энергии в пограничном слое и характерным временем нелинейных взаимодействий. На масштабах, меньших чем синоптические, инерционный интервал существует и там, согласно теории двумерной турбулентности, распределение энергии имеет вид k^{-3} (k - пространственное волновое число). Однако, начиная с масштаба примерно 800 км, распределение энергии подчиняется закону $k^{-5/3}$ как в трехмерной турбулентности Колмогорова, хотя на этих масштабах атмосфера, очевидно, квазидвумерна.

Если же дискретная система обладает лишь одним квадратичным инвариантом (энергией), то при наличии генерирующего источника возникает проблема параметризации подсеточной диссипации с тем, чтобы скомпенсировать избыточный каскад энергии по спектру и правильно описать ее трансформацию. Каскад энергии в сторону длинных волн принципиально определяется рэлеевской диссипацией в планетарном пограничном слое, что накладывает требования на правильное его описание.

Далее, закон сохранения момента количества движения относительно оси вращения Земли по существу определяет распределение скорости ветра у поверхности Земли (наличие пассатов). Важным также является закон сохранения энтропии в адиабатическом приближении. Кроме того, следует отметить конкретные физические явления типа циклогенеза, правильное воспроизведение которого требует хорошей аппроксимации по спектру некоторых линейных операторов (по собственным и сингулярным числам), 30–60-дневных колебаний в тропиках, распространения квазистационарных волн и многих других процессов, ответственных за климатические характеристики. Особое значение имеет решение уравнений переноса малых примесей, имеющих большие пространственные градиенты, что накладывает очень сильное требование на условие монотонности разностных схем.

Последствия климатических изменений, вызванных увеличением концентрации парниковых газов в атмосфере, сказываются на состоянии основных природных ресурсов (в первую очередь, биосферы), разнообразных областей деятельности общества и здоровья людей. При исследовании региональных аспектов этих изменений приходится решать задачи двоякого типа. С одной стороны, проблема параметризации процессов подсеточного масштаба требует знания региональных особенностей процессов взаимодействия атмосферы с подстилающей поверхностью, наиболее ярко проявляющихся в пограничном слое атмосферы. С другой стороны, для конкретных регионов мира необходимо оценить степень воздействия глобальных изменений климата на природную среду (состояние подстилающей поверхности, естественные экосистемы, водные ресурсы и т.д.) и возможности минимизации ущерба от неблагоприятных для человека последствий.

Хотя глобальные гидродинамические модели являются в настоящее время наиболее мощным инструментом исследования климата, все же их разрешение пока является недостаточным для воспроизведения локальных особенностей конкретных регионов. Региональные (мезомасштабные) негидростатические модели атмосферы, по охвату территории и пространственному разрешению, занимают промежуточное положение между моделями общей циркуляции атмосферы и моделями пограничного слоя. Необходимость создания таких моделей диктуется невозможностью воспроизведения мезомасштабной структуры метеорологических полей в рамках крупномасштабных моделей. Между тем, мезомасштабные вариации распределения температуры, облачности, осадков и других метеорологических величин имеют принципиальное значение для ряда задач, в частности, для прогноза погоды в заданном пункте. Проблема уточнения пространственной картины распределения метеорологических величин возникает также в задаче оценки региональных изменений климата, которая решается с помощью соответствующих региональных моделей.

Принципиальной здесь является проблема сопряжения региональной и глобальной моделей, в частности, выбор подходящих «боковых» граничных условий.

В случае задач прогноза погоды и климата естественным способом задания этих условий является использование прогностических полей крупномасштабных моделей. При этом область расчета региональной модели занимает несколько ячеек конечно-разностной сетки глобальной модели. Таким образом, региональное моделирование является решением проблемы регионализации (масштабирования, «даунскейлинга») прогноза. Кроме применения методов гидродинамического моделирования, эта задача может быть также решена с привлечением процедур интерполяции, построенных на основе простых физических или статистических моделей (Чавро и Дмитриев, 2002). Главное преимущество этих методов состоит в их простоте, однако с точки зрения точности восстановления мезомасштабной структуры метеорологических полей, гидродинамическое моделирование является, по-видимому, наиболее перспективным направлением, возможно, в комбинации со статистическими подходами.

Кроме задач прогноза метеорологических полей, региональные модели используются также для расчета переноса загрязняющих веществ. При вычислении полей концентраций газообразных и аэрозольных загрязнений вокруг проектируемых промышленных предприятий и других источников выбросов, проводят, как правило, сценарные расчеты. В то же время, часто возникают задачи, в которых необходимо выяснить причину уже наблюдавшихся повышенных концентраций. Для решения этих задач могут использоваться методы как прямого (известен источник – требуется вычислить поле концентрации загрязнителя), так и обратного моделирования (известно поле концентрации загрязнителя – необходимо определить источник). В обоих случаях используют региональные модели совместно с описанием процесса переноса примесей, а конкретная синоптическая ситуация, при которой имело место превышение предельно допустимой концентрации, задается полями реанализа.

Мезомасштабные модели используются и для решения ряда фундаментальных задач. Одной из таких задач, специфических для геофизической гидродинамики, является задача взаимодействия атмосферных движений различных масштабов. Дело в том, что движения синоптического масштаба и мезомасштаба взаимно влияют друг на друга: синоптический поток определяет интенсивность мезомасштабных (в частности, бризовых) циркуляций, а мезомасштабные циркуляции, будучи вихревыми структурами, вызывают дополнительное перемешивание нижней тропосферы, и, следовательно, трение крупномасштабного потока о подстилающую поверхность. Как показывают оценки ряда авторов, мезомасштабные потоки тепла, влаги и количества движения сопоставимы по величине с турбулентными потоками. При этом, турбулентные потоки параметризованы в той или иной степени во всех современных моделях общей циркуляции атмосферы, а методы параметризации мезомасштабных потоков находятся только в стадии разработки.

В области больших горизонтальных масштабов в свободной атмосфере принципиальное значение имеет диссипация кинетической энергии в прилежащем к поверхности Земли пограничном слое. Если принять, что диссипация в атмосфере осуществляется главным образом через трение о поверхность Земли, то можно утверждать, что основной вклад в этот процесс обусловлен крупными вихрями, предельные размеры которых определяются размерами рассматриваемой системы. При внешнем форсинге (накачке) энергия будет накапливаться в крупных вихрях и ее величина в квазиравновесном состоянии будет определяться уровнями форсинга и диссипации. Если диссипация в пограничном слое отсутствует, то уровень энергии будет определяться величиной внутренней диссипации (переходом в тепло и его излучением).

Вихреразрешающие нестационарные негидростатические численные модели (LES-модели в англоязычной литературе) турбулентных течений представляют собой мощный инструмент, позволяющий исследовать широкий спектр трехмерных и квазидвумерных составляющих течения жидкости при различных условиях. В геофизической

гидродинамике такие модели обычно применяются для исследования мелкомасштабной турбулентности и квазиупорядоченных крупномасштабных структур в пограничных слоях атмосферы и океана (Glazunov and Lykossov, 2003, Глазунов, 2010). Можно сформулировать следующие, принципы построения вихреразрешающей модели, хорошо зарекомендовавшие себя на практике, по крайней мере, для несжимаемой жидкости (Глазунов, 2009а).

Во-первых, предпочтительны консервативные пространственные аппроксимации, поскольку несохранение первого (импульса) и второго (энергии) моментов может существенно повлиять на результаты моделирования). Далее, повышение порядка аппроксимации численных схем, совместно с использованием подходящих замыканий динамического типа, может дать существенный выигрыш. Ошибки наложения (бóльшие в схемах высокого порядка точности) эффективно подавляются замыканием, а дисперсионные ошибки уменьшаются по мере повышения порядка схемы. При этом, повышение порядка аппроксимации рассматривается не как способ достижения той же точности решения при более грубом разрешении, а, скорее, как прием, позволяющий уменьшить спектральный диапазон, в котором ошибки аппроксимации преобладают по сравнению с эффектами параметризуемых процессов. Наконец, генерируемая моделью изменчивость не обязательно должна точно воспроизводить амплитуду турбулентных пульсаций вплоть до масштабов, определяемых шагом сетки. Использование фильтра, подавляющего преимущественно коротковолновые гармоники, также уменьшает ошибки аппроксимации нелинейных членов. Однако, в этом случае, турбулентное замыкание, наряду с параметризацией взаимодействий разрешаемых явно пульсаций с движениями "подсеточного" масштаба, должно содержать члены, восполняющие вклад подавленных фильтрацией коротковолновых гармоник в модельную динамику.

Заклячая данный раздел, необходимо также отметить проблему отображения вычислительных алгоритмов на суперкомпьютерную архитектуру. В настоящее время развитие вычислительной техники и вычислительных алгоритмов связано с параллельными вычислениями. Современные оценки вычислительных алгоритмов могут существенно отличаться от устоявшихся оценок, связанных с оценками последовательных вычислений. Часто исследователь, использующий массивные параллельно-вычислительные системы, вынужден выбирать алгоритм, может быть, не самый эффективный для последовательных вычислений, но легко распараллеливаемый. Поскольку в процессе решения климатических задач количество арифметических операций огромно, а также принимая во внимание важность этих проблем, кажется целесообразным конструировать вычислительные системы, непосредственно ориентированные на решение этих задач.

1.3. Основные уравнения гидротермодинамики крупномасштабных процессов

Процессы, происходящие в атмосфере и океане, принадлежат к числу сложных физических явлений, изучение которых невозможно без привлечения уравнений гидротермодинамики, отражающих основные законы физики. Подробное изложение этого вопроса можно найти, в частности, в книгах Ландау и Лифшица (1953), Кочина и др. (1963а, 1963б), Лоренца (1970), Марчука и др. (1987), Дымникова (2007). Состояние жидкости, под которой понимается любая жидкая или газообразная среда, в любой момент времени t и в любой точке трехмерного пространства с координатами $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ можно охарактеризовать векторным полем скорости $\vec{u}(\vec{x}, t) = \{u_1(\vec{x}, t), u_2(\vec{x}, t), u_3(\vec{x}, t)\}$ и полями двух термодинамических характеристик – например, полем давления $p(\vec{x}, t)$ и плотности $\rho(\vec{x}, t)$. Простейшим уравнением гидромеханики, выражающим физический закон сохранения вещества, является уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (1.3.1)$$

или

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\nabla \cdot \vec{u}, \quad (1.3.2)$$

где $d/dt = \partial/\partial t + \vec{u} \cdot \nabla$.

В качестве основных уравнений, выражающих второй закон Ньютона в применении к малому объему жидкости и описывающих баланс импульса, целесообразно использовать уравнения Навье-Стокса, которые можно покомпонентно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \nabla \cdot \rho u_i \vec{u} = \rho (F_i^e + F_i^s) - \frac{\partial p}{\partial x_i}, \quad (1.3.3)$$

где $F_i^e = F_i^e(\vec{x}, t)$ и $F_i^s = F_i^s(\vec{x}, t)$ представляют собой i -ые компонента массовых внешних и поверхностных сил, соответственно. Используя уравнение неразрывности (1.3.2), уравнения (1.3.3) можно переписать следующим образом:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \vec{F}^e + \vec{F}^s - \frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (1.3.4)$$

Во многих практических случаях изменения плотности ρ движущейся жидкой частицы оказываются настолько малыми, что ими можно пренебречь. Тогда в уравнении неразрывности (1.3.2) слагаемыми в левой части можно опустить, после чего оно приобретает вид

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (1.3.5)$$

Из внешних сил наиболее существенными для климатической системы являются сила тяжести и эффекты, связанные с вращением Земли, так что в общем случае следует принять (в системе координат, связанной с вращающейся Землей):

$$\vec{F}^e = \vec{g}_0 - 2\vec{\Omega} \times \vec{u} - \vec{\Omega} \times (\vec{\Omega} \times \vec{r}), \quad (1.3.6)$$

где $\vec{g}_0 = (0, 0, -g)^T$ – гравитационное ускорение, g – гравитационная постоянная, $\vec{\Omega} = \Omega_0(0, \cos \varphi, \sin \varphi)$ – вектор угловой скорости вращения Земли, которая меняется как по модулю, так и по направлению (φ – широта, $\Omega_0 = |\vec{\Omega}|$), $\vec{r}$ – радиус-вектор. Второе слагаемое в формуле (1.3.6) представляет собой ускорение Кориолиса, а третье – центробежное ускорение. Если $\vec{R}$ – проекция $\vec{r}$ на плоскость, перпендикулярную к оси вращения Земли, то $\vec{\Omega} \times (\vec{\Omega} \times \vec{r}) = -\Omega_0^2 \vec{R}$. Гравитационное ускорение и центробежное ускорение можно объединить в ускорение силы тяжести $\vec{g} = \vec{g}_0 + \Omega_0^2 \vec{R}$. В некоторых приложениях меридиональной компонентой ускорения Кориолиса пренебрегается и вместо слагаемого $2\vec{\Omega} \times \vec{u}$ в выражении (1.3.6) используется вектор $(0, 0, f)^T$, где

величину $f = 2\Omega_0 \sin \varphi$ обычно называют параметром Кориолиса. Поверхностные силы представляют собой силы трения и в уравнениях Навье-Стокса они записываются следующим образом: $\vec{F}^s = \nu \nabla^2 \vec{u}$, где ν – коэффициент (кинематической) вязкости. В уравнениях Рейнольдса (осредненные по некоторым пространственным и временным масштабам уравнения Навье-Стокса) турбулентные силы трения параметризуются тем или иным способом (см. главу 2).

В геофизических моделях используются преимущественно две системы координат: сферические (λ, φ) , направленные, соответственно на восток (долгота) и север (широта), и декартовы (x, y) . Декартову систему координат часто называют также локальной декартовой системой, поскольку начало системы помещается в некоторую «локальную» точку на подстилающей поверхности. В некоторых теоретических работах, как правило, при численном моделировании осесимметричных вихрей (например, торнадо), применялась цилиндрическая система координат. Сферическая система координат используется в глобальных моделях, в то время как декартова система координат характерна, например, для региональных моделей и вихреразрешающих моделей пограничного слоя, моделей кучевых облаков и т.д. Как в сферической, так и в декартовой системах, часто применяется вертикальная координата z , направленная против силы тяжести, или по внешней нормали к поверхности сферы, аппроксимирующей поверхность Земли (эффекты более точной модели реальной формы Земли – геоида, а также неоднородности силы тяжести, играют, по-видимому, сравнительно небольшую роль). В дальнейшем, иногда будет удобно компоненты вектора $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$ записывать как $(u, v, w)^T$.

В сферической системе координат покомпонентная форма уравнений баланса импульса будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} - \frac{uv \operatorname{tg} \varphi}{r} + \frac{uw}{r} - 2\Omega_0 \sin \varphi v + 2\Omega_0 \cos \varphi w &= -\frac{1}{\rho r \cos \varphi} \frac{\partial p}{\partial \lambda} + F_u^s, \\ \frac{dv}{dt} + \frac{u^2 \operatorname{tg} \varphi}{r} + \frac{vw}{r} + 2\Omega_0 \sin \varphi u &= -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + F_v^s, \\ \frac{dw}{dt} - \frac{u^2 + v^2}{r} - 2\Omega_0 \cos \varphi u &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + F_w^s, \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

где $u = r \cos \varphi d\lambda / dt$, $v = r d\varphi / dt$, $w = dr / dt = dz / dt$ и

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{u}{r \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{v}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + w \frac{\partial}{\partial z}.$$

При этом

$$\nabla \cdot \rho \vec{u} = \frac{1}{r^2 \cos \varphi} \left(\frac{\partial \rho u r}{\partial \lambda} + \frac{\partial \rho v r \cos \varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial \rho w r^2 \cos \varphi}{\partial z} \right).$$

Для сжимаемой среды выписанная система из четырех уравнений (баланса массы и баланса трех компонент импульса) содержит пять неизвестных функций и в связи с этим возникает проблема их замыкания. Для получения замкнутой системы используется дополнительное, пятое, уравнение притока тепла, выражающего физический закон сохранения энергии (см. Ландау и Лифшиц, 1951). В случае идеального газа, уравнение состояния которого имеет вид

$$p = R\rho T, \quad (1.3.8)$$

где T – температура в градусах Кельвина, а постоянная R равна разности удельных теплоемкостей среды при постоянном давлении c_p и при постоянном объеме c_v ($R = c_p - c_v$), уравнение притока тепла может быть записано следующим образом:

$$c_p \rho \frac{dT}{dt} - \frac{dp}{dt} = c_p \rho Q. \quad (1.3.9)$$

Здесь $c_p \rho Q$ – суммарный приток тепла, обусловленный переходом части кинетической энергии в теплоту в результате работы сил трения (в реальных условиях обычно играет незначительную роль и им можно пренебречь); молекулярной диффузией $\chi \nabla^2 T$, где χ – коэффициент молекулярной диффузии (температуропроводности в данном случае); радиационными процессами, фазовыми превращениями, химическими реакциями и т.п. Полезно использовать понятие потенциальной температуры θ , вводя ее следующим образом:

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R/c_p},$$

где p_0 – некоторое стандартное значение давления, для атмосферы обычно принимаемое равным 1000 гПа. В терминах потенциальной температуры уравнение (1.3.9) принимает вид

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\theta}{T} Q. \quad (1.3.10)$$

Для жидкости роль уравнения состояния играет закон ее теплового расширения, в простейшем виде выражающийся линейной зависимостью

$$\rho - \rho_0 = -\lambda \rho_0 (T - T_0), \quad (1.3.11)$$

где ρ и ρ_0 – плотности при температурах T и T_0 , соответственно, а λ – коэффициент теплового расширения. При этом условии уравнение притока тепла имеет вид

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} - \lambda T \frac{dp}{dt} = \rho c_p Q,$$

а поскольку коэффициент λ для обычных жидкостей очень мал (для воды $\lambda \approx 1.5 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ при температуре 15°C), то в результате получается уравнение

$$\frac{dT}{dt} = Q. \quad (1.3.12)$$

По своему виду уравнения (1.3.10) и (1.3.12) при $Q = 0$ совпадают с уравнением переноса,

описывающем изменение концентрации некоторой пассивной (не оказывающей влияния на динамику потока) примеси в рассматриваемой среде. В моделях используются, как правило, осредненные по Рейнольдсу уравнения (1.3.9), (1.3.10) или (1.3.12). В этом случае, слагаемое $c_p \rho Q$ включает также турбулентные притоки тепла. В общем случае к выписанной системе уравнений необходимо добавить уравнения для водяного пара и других атмосферных примесей.

Законы сохранения. Пусть на единицу массы $K = (u^2 + v^2 + w^2)/2$ означает кинетическую энергию, $\Phi = gz$ есть потенциальная энергия, а $I = c_v T$ представляет собой внутреннюю энергию. Умножая первое из уравнений (1.3.7) на u , второе – на v , третье – на w и складывая получившиеся соотношения, можно получить следующее уравнение для кинетической энергии:

$$\frac{dK}{dt} = -\frac{1}{\rho} \vec{u} \cdot \nabla p - gw + \vec{u} \cdot \vec{F}^s. \quad (1.3.13)$$

Уравнение для потенциальной энергии имеет вид:

$$\frac{d\Phi}{dt} \equiv g \frac{dz}{dt} = gw. \quad (1.3.14)$$

Применение оператора d/dt к обеим частям уравнения состояния (1.3.8) дает соотношение

$$\frac{dp}{dt} = \frac{p}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + R\rho \frac{dT}{dt},$$

подстановка которого в уравнение (1.3.9) с учетом уравнения неразрывности (1.3.2) приводит к уравнению для внутренней энергии:

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \vec{u} + c_p Q. \quad (1.3.15)$$

Складывая уравнения (1.3.13), (1.3.14) и (1.3.15), можно получить следующее уравнение для полной энергии:

$$\frac{d(K + \Phi + I)}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot p\vec{u} + \vec{u} \cdot \vec{F}^e + c_p Q. \quad (1.3.16)$$

Интегрирование этого уравнения по некоторой области с фиксированной границей показывает, что слагаемое $(-\rho^{-1} \nabla \cdot p\vec{u})$ выражает работу сил давления на границе этой области и описывает, тем самым, перенос энергии из одной области в другую. Если нормальная составляющая скорости на границе области равна нулю, а силы трения и источники тепла отсутствуют, то из (1.3.16) следует интегральный закон сохранения полной энергии.

Важным является также закон сохранения *полного момента импульса* на единицу массы относительно оси вращения Земли, который определяется следующим образом:

$$M = \Omega_0 r^2 \cos^2 \varphi + ru \cos \varphi. \quad (1.3.17)$$

Первое слагаемое в правой части выражения (1.3.17) представляет собой момент, который имел бы место в случае вращения атмосферы как твердого тела вместе с Землей. Второе слагаемое характеризует момент, связанный с движением относительно Земли. Применение оператора d/dt к обеим частям уравнения (1.3.17) приводит, с учетом первого из уравнений (1.3.7), к уравнению

$$\frac{dM}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \lambda} + r \cos \varphi F_u^s,$$

которое можно переписать с учетом уравнения неразрывности в дивергентной форме:

$$\frac{\partial \rho M}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u} \rho M = -\frac{\partial p}{\partial \lambda} + r \cos \varphi \rho F_u^s. \quad (1.3.18)$$

Если проинтегрировать уравнение (1.3.18) по всему объему атмосферы V , то будет иметь место соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho M dV + \iiint_V \nabla \cdot \vec{u} \rho M dV = -\iiint_V \frac{\partial p}{\partial \lambda} dV + \iiint_V \rho r \cos \varphi F_u^s dV. \quad (1.3.19)$$

Выбрав в качестве краевых условий:

$$\begin{aligned} v \cos \varphi &\rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \varphi \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}, \\ w &= 0 \quad \text{при} \quad r = a \quad \text{и} \quad r = r_a, \end{aligned}$$

где a – радиус Земли, а r_a соответствует верхней границе атмосферы, а также приняв условие периодичности функций по λ , формулу (1.3.19) можно переписать следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho M dV = \iiint_V \rho r \cos \varphi F_u^s dV. \quad (1.3.20)$$

Из этого уравнения следует, что полный момент импульса изменяется лишь за счет момента поверхностных сил.

Гидростатическое приближение и примитивные уравнения. При рассмотрении конкретных течений систему уравнений гидротермодинамики можно в ряде случаев упростить, пренебрегая теми или иными членами. В случае крупномасштабных движений, под которыми понимаются процессы с характерным горизонтальным пространственным масштабом $L \sim 10^3$ км, вертикальным масштабом $H \sim 10$ км и временным масштабом $T \sim 1$ суток ($\Omega_0 \approx 7,3 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$), характерный масштаб скорости горизонтальных движений будет $U \sim \frac{L}{T} \sim 10$ м/с, а вертикальных движений – $W \sim \frac{H}{T} \sim 10^{-1}$ м/с. Поскольку безразмерный параметр $\Omega_0^2 L / g \sim 10^{-3}$ мал, это означает, что центробежными силами, входящими в уравнения движения в том же качестве, что и гравитационные силы, можно пренебречь, а силу тяжести считать постоянной. На рассматриваемых масштабах в третьем уравнении движения системы (1.3.7) все слагаемые, кроме $\rho^{-1} \partial p / \partial z$, много меньше g , так что с хорошей точностью выполняется гидростатический баланс:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = -g. \quad (1.3.21)$$

Это соотношение позволяет отфильтровать вертикальное распространение звуковых волн, а также избежать необходимости задания начальных условий для w .

Вместе с тем, использование этого уравнения приводит к нарушению уравнения для кинетической энергии (1.3.13), которое, однако, можно восстановить, если переопределить кинетическую энергию, положив $K = (u^2 + v^2) / 2$, а также исключить из первых двух уравнений движения (1.3.7) слагаемые, содержащие w . Однако, в результате не будет выполняться уравнение баланса момента импульса (1.3.18). Этого можно добиться, если пренебречь расхождением радиусов-векторов $\vec{r}$ и использовать во всех уравнениях вместо r средний радиус Земли a . В результате сделанных допущений система уравнений (1.3.7) может быть записана в виде так называемых примитивных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} - \left(f + \frac{utg\varphi}{a} \right) v &= -\frac{1}{\rho a \cos \varphi} \frac{\partial p}{\partial \lambda} + F_u^s, \\ \frac{dv}{dt} + \left(f + \frac{utg\varphi}{a} \right) u &= -\frac{1}{\rho a} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + F_v^s, \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} &= -g, \end{aligned} \quad 1.3.22)$$

где теперь

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{u}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + w \frac{\partial}{\partial z}.$$

При этом

$$\nabla \cdot \rho \vec{u} = \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial \rho u}{\partial \lambda} + \frac{\partial \rho v \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial \rho w}{\partial z}.$$

1.4. Вертикальные координаты

Поскольку плотность $\rho > 0$, то, как следует из третьего уравнения системы (1.3.22), давление p есть монотонная функция z , так что вместо этой вертикальной координаты можно использовать давление. В настоящее время используется несколько модификаций вертикальной координаты, базирующихся на этой идее. При переходе от одной системы координат к другой меняется форма системы уравнений. Наиболее строгим подходом к записи системы уравнений гидротермодинамики в произвольной системе координат является использование аппарата тензорного анализа. При этом вектор скорости трактуется как тензор первого ранга, и его компоненты записываются в новой системе координат согласно правилам преобразования тензорных компонент. Формулируются также обобщенные правила преобразования производных компонент векторов и скалярных величин. Подробное изложение этого подхода можно найти в книге Р. Пильке (Pielke, 2002). Здесь же будет рассмотрен частный случай изменения только вертикальной координаты в декартовой системе координат, что позволит упростить выкладки.

Вместо локальной прямоугольной декартовой системы координат (x, y, z, t) вводится система $(x, y, \eta(x, y, z, t), t)$. Новые переменные должны быть независимы,

условием чего является неравенство нулю якобиана:

$$J = \begin{vmatrix} \partial x / \partial x & \partial x / \partial y & \partial x / \partial z & \partial x / \partial t \\ \partial y / \partial x & \partial y / \partial y & \partial y / \partial z & \partial y / \partial t \\ \partial \eta / \partial x & \partial \eta / \partial y & \partial \eta / \partial z & \partial \eta / \partial t \\ \partial t / \partial x & \partial t / \partial y & \partial t / \partial z & \partial t / \partial t \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \partial \eta / \partial x & \partial \eta / \partial y & \partial \eta / \partial z & \partial \eta / \partial t \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \partial \eta / \partial z \neq 0 \quad (1.4.1)$$

Если $\partial \eta / \partial z$ – непрерывная функция, то она не должна менять знак, поскольку в случае изменения знака в какой-то точке она обратится в нуль. Таким образом, новая вертикальная координата должна монотонно зависеть от z . Для преобразованию частных производных из одной координатной системы в другую, удобно производные по x , y и t в η -системе обозначить нижним индексом η . В силу правила дифференцирования сложной функции, имеют место следующие соотношения:

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s_\eta} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial s} \quad (s = x, y, t), \quad (1.4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z}. \quad (1.4.3)$$

В дальнейшем будет удобно заменить производные $\partial \eta / \partial s$, $s = x, y, z, t$, выражениями, содержащими геопотенциал $\Phi = gz$. Дифференцирование этой функции по $s = x, y$ или t приводит к следующему соотношению

$$\frac{\partial \Phi}{\partial s} = \frac{\partial \Phi}{\partial s_\eta} + \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial s} = 0,$$

откуда следует, что

$$\frac{\partial \eta}{\partial s} = - \frac{\partial \Phi}{\partial s_\eta} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right)^{-1}. \quad (1.4.4)$$

Выражение для производной новой вертикальной координаты по z также получается дифференцированием геопотенциала и имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \eta}{\partial z} = g \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right)^{-1}. \quad (1.4.5)$$

Полная производная в новой системе координат принимает вид:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t_\eta} + u \frac{\partial}{\partial x_\eta} + v \frac{\partial}{\partial y_\eta} + \dot{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad (1.4.6)$$

где $\dot{\eta} = d\eta / dt$.

Уравнение гидростатики

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g$$

может быть переписано в новых координатах. Согласно (1.4.3), (1.4.4)

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial \eta} g \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right)^{-1} = -\rho g, \quad (1.4.7)$$

откуда

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} = -\rho \frac{\partial \Phi}{\partial \eta}. \quad (1.4.8)$$

Уравнение неразрывности, записанное в z -системе координат:

$$\frac{d \ln \rho}{dt} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

также можно преобразовать. Если воспользоваться формулами (1.4.2) и (1.4.3), определением вертикальной скорости

$$w \equiv \frac{dz}{dt} = \frac{\partial z}{\partial t_\eta} + u \frac{\partial z}{\partial x_\eta} + v \frac{\partial z}{\partial y_\eta} + \dot{\eta} \frac{\partial z}{\partial \eta} \quad (1.4.9)$$

и равенством

$$\frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z},$$

то после несложных выкладок получается искомая форма уравнения неразрывности в новых координатах

$$\frac{d \ln \rho}{dt} + \frac{d}{dt} \left(\ln \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial u}{\partial x_\eta} + \frac{\partial v}{\partial y_\eta} + \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial \eta} = 0. \quad (1.4.10)$$

В уравнениях движения горизонтальные компоненты градиента давления согласно (1.4.2), (1.4.4) и (1.4.8) записываются в виде:

$$\frac{\partial p}{\partial s} = \frac{\partial p}{\partial s_\eta} + \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial s} = \frac{\partial p}{\partial s_\eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial \Phi}{\partial s_\eta} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right)^{-1} = \frac{\partial p}{\partial s_\eta} + \rho \frac{\partial \Phi}{\partial s_\eta}, \quad (1.4.11)$$

где $s = x, y$. Выражение для вертикального градиента давления, как видно из (1.4.7), имеет вид:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = g \frac{\partial p}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right)^{-1}. \quad (1.4.12)$$

Тогда уравнения движения в случае произвольной вертикальной координаты приобретают вид:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_\eta} - \frac{\partial \phi}{\partial x_\eta} + fv + F_u, \\ \frac{dv}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y_\eta} - \frac{\partial \phi}{\partial y_\eta} - fu + F_v, \end{aligned} \quad (1.4.13)$$

где полные производные в левых частях представлены в форме (1.4.6). В уравнении притока тепла

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\theta}{T} Q \quad (1.4.14)$$

меняется только выражение для индивидуальной производной.

Система семи уравнений, включающая уравнение неразрывности (1.4.10), три уравнения движения (1.4.13), уравнение притока тепла (1.4.14), уравнение состояния сухого воздуха $p = \rho RT$ и формулу связи между потенциальной и абсолютными температурами, остается незамкнутой, поскольку в ней появились две новые неизвестные - геопотенциал и аналог вертикальной скорости $\dot{\eta}$. Замыкание производится с помощью двух дополнительных уравнений. Первое получается при применении оператора полной производной к определению геопотенциала $\Phi = gz$:

$$\frac{d\Phi}{dt} = gw. \quad (1.4.15)$$

В справедливости же второго соотношения

$$\dot{\eta} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right)^{-1} \left(gw - \frac{\partial \Phi}{\partial t_\eta} - u \frac{\partial \Phi}{\partial x_\eta} - v \frac{\partial \Phi}{\partial y_\eta} \right) \quad (1.4.16)$$

нетрудно убедиться, выражая $\dot{\eta}$ из (1.4.9). Из системы девяти уравнений, включающей, помимо упомянутых выше, также (1.4.15) и (1.4.16), можно вывести систему уравнений гидротермодинамики с любой вертикальной координатой. В таблице 1.4.1 приведены наиболее часто встречающиеся в литературе варианты вертикальной координаты. На рис. 1.4.1 изображены линии равного значения разных вертикальных координат в z -системе.

Табл. 1.4.1. Вертикальные координаты.

№	Определение вертикальной координаты	Обозначения	Название системы координат
1	$\eta = p$	p – давление	изобарическая, p -система
2	$\eta = p / p_s$	p_s – давление на поверхности Земли	σ - система
3	$\eta = (p - p_t) / (p_s - p_t)$	p_t – давление на верхней границе области интегрирования модели	σ - система
4	$\eta = \theta$	θ – потенциальная температура	изэнтропическая, θ - система
5	$\eta = \frac{p - p_t}{p_s - p_t} \frac{p_r(0) - p_t}{p_r(z_s) - p_t}$	p_r – вертикальный профиль давления стандартной атмосферы, z_s – высота подстилающей поверхности над уровнем моря	η - система
6	$\eta = (\theta - \theta_t) / (\theta_s - \theta_t)$	θ_s – потенциальная температура на подстилающей поверхности, θ_t – потенциальная температура на верхней границе модельной области	$\sigma - \theta$ система
7	$\eta = z_t (z - z_s) / (z_t - z_s)$	z_t – высота верхней границы области интегрирования модели	$\sigma - z$ система

Выбор потенциальной температуры в качестве вертикальной координаты связан с тем удобством, что в таком случае при адиабатическом процессе ($\dot{\theta} = 0$) все полные производные принимают «двумерный» вид:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t_\theta} + u \frac{\partial}{\partial x_\theta} + v \frac{\partial}{\partial y_\theta}.$$

В то же время, потенциальная температура не всегда монотонно меняется с высотой, в частности, при инверсиях и в конвективных пограничных слоях, что ограничивает область применимости изэнтропической системы координат относительно узким множеством атмосферных течений (среди которых можно упомянуть, например, адиабатическое обтекание устойчиво стратифицированным потоком орографического препятствия).

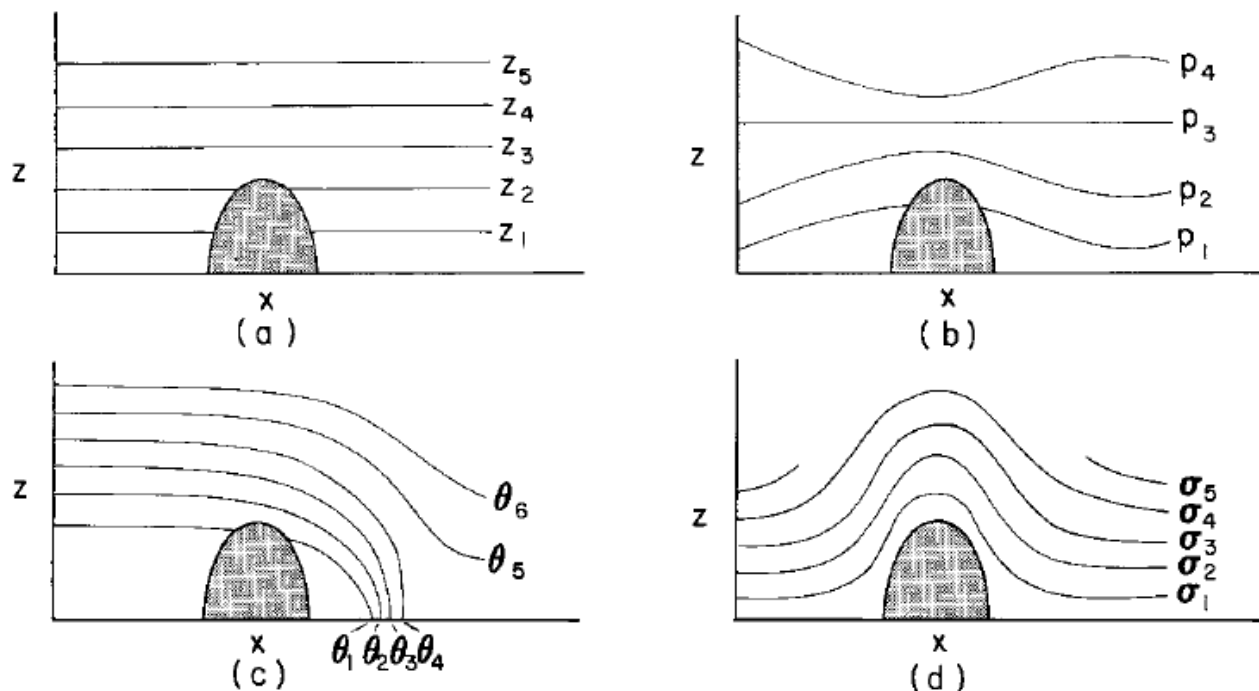


Рис. 1.4.1. Изолинии вертикальных координат в z -системе: (a) z -координата, (b) изобарическая координата, (c) изэнтропическая координата, (d) σ -координата (Pielke, 2002).

Изобарическая система координат (Phillips, 1957) была предложена ввиду двух обстоятельств. Во-первых, при измерениях вертикальных профилей метеорологических величин в качестве вертикальной координаты используется, как правило, давление (в первую очередь, имеются ввиду аэрологические наблюдения). Поэтому, в модели с p -системой координат эти данные могут быть использованы для формирования начальных условий и при усвоении данных без вносящего ошибки перехода к другой системе координат. И во-вторых, в этой системе координат, в предположении гидростатики, удастся получить линейное стационарное уравнение неразрывности, формально исключающее образование акустических волн. В самом деле, подставив в уравнение (1.4.10) $\eta = p$ и учесть уравнение гидростатики

$$\frac{\partial z}{\partial p} = -\frac{1}{\rho g},$$

несложно получить

$$\frac{\partial u}{\partial x_p} + \frac{\partial v}{\partial y_p} + \frac{\partial \tau}{\partial p} = 0, \quad (1.4.17)$$

где $\tau \equiv \dot{p}$ – аналог вертикальной скорости в изобарической системе координат. Исключение из решения системы гидротермодинамики акустических волн облегчает численное решение, поскольку эти волны являются очень короткими и потому не могут быть корректно воспроизведены на конечно-разностной сетке модели. Неудобство же p -системы заключается в том, что, в отличие от z -системы, нижняя граница области интегрирования (т. е. подстилающая поверхность) меняется во времени и пространстве, поскольку во времени и пространстве меняется приземное давление. Таким образом, в систему уравнений приходится добавлять уравнение для тенденции приземного давления, содержащее малую разность больших величин.

Следует заметить, что и в исходной z -системе координат нижняя граница области интегрирования может быть сложной (при наличии рельефа), и тогда возникает проблема

аппроксимации этой границы (см., например, метод внесенной границы, раздел 3.4) и постановки на ней граничных условий. Чтобы обойти эти проблемы, были предложены вертикальные координаты, объединенные общим названием « σ - координаты» (табл. 1.4.1). Любая σ - координата на поверхности Земли равна 1 (или 0 в случае σ - z системы координат), а на верхней границе области интегрирования - некоторому фиксированному значению, определяющему приблизительную высоту этой поверхности. Пожалуй, наиболее распространенными являются σ - координаты, связанные с давлением.

При использовании этих координат, однако, возникает следующая проблема. Слагаемое с горизонтальным градиентом давления принимает, например, в σ - системе координат № 3 (табл. 1.4.1), такой вид

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \frac{\sigma}{p_*} \frac{\partial p_*}{\partial x}, \quad (1.4.18)$$

где $p_* = p_s - p_t$. Как можно понять из рис. 1.4.2, оба слагаемых правой части (1.4.18) возрастают в окрестности крутых склонов рельефа, и при этом имеют разные знаки. В идеализированном случае покоящейся атмосферы (тривиальное решение системы уравнений гидротермодинамики при соответствующих граничных условиях) эти слагаемые полностью компенсируют друг друга. В реальных же течениях их сумма, как правило, оказывается по абсолютной величине значительно меньше обоих слагаемых. Эта особенность, получившая в литературе название «малой разности больших величин», негативно сказывается на устойчивости конечно-разностного решения, поскольку малые относительные ошибки слагаемых приводят к большой относительной ошибке суммы. А поскольку горизонтальный градиент давления является ключевым фактором развития атмосферной циркуляции любого масштаба, эта ошибка приводит к сильному искажению истинного решения системы. Описанная проблема частично снимается при использовании предложенной Ф. Мезингером (Mesinger et al., 1988) η - координаты (№ 5 в табл. 1.4.1). В η -координатах поверхность Земли соответствует возрастающему с высотой значению $\eta_s = [p_r(0) - p_t] / [p_r(z_s) - p_t]$, в результате чего изоповерхности η выполаживаются, так что слагаемые, аналогичные обсужденным выше из (1.4.18), уменьшаются.

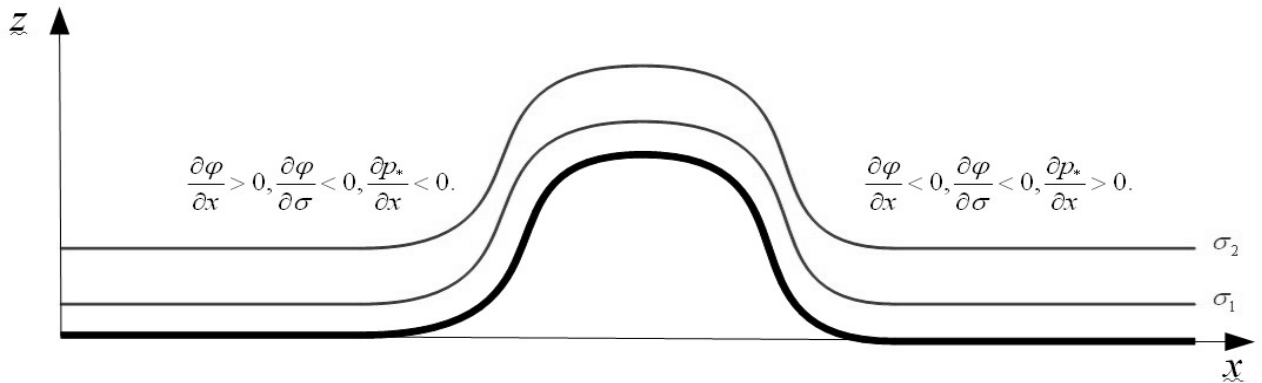


Рис. 1.4.2. Пояснение знаков слагаемых в уравнении (1.4.18).

В качестве примера можно привести систему уравнений гидротермодинамики атмосферы, которая в сферической σ -системе координат, где под σ понимается координата № 2 из табл. 1.4.1, имеет следующий вид (Дымников и др., 2005):

$$\frac{du}{dt} - \left(f + \frac{u}{a} \operatorname{tg} \varphi \right) v + \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} + \frac{RT}{p_s} \frac{\partial p_s}{\partial \lambda} \right) = F_u, \quad (1.4.19)$$

$$\frac{dv}{dt} + \left(f + \frac{u}{a} \operatorname{tg} \varphi \right) u + \frac{1}{a} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} + \frac{RT}{p_s} \frac{\partial p_s}{\partial \varphi} \right) = F_v, \quad (1.4.20)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} = - \frac{RT}{\sigma}, \quad (1.4.21)$$

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial p_s u}{\partial \lambda} + \frac{\partial p_s v \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial p_s \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = 0, \quad (1.4.22)$$

$$\frac{dT}{dt} - \frac{RT}{c_p \sigma p_s} \left[p_s \dot{\sigma} + \sigma \left(\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{u}{a \cos \varphi} \frac{\partial p_s}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial p_s}{\partial \varphi} \right) \right] = Q, \quad (1.4.23)$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{u}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \dot{\sigma} \frac{\partial}{\partial \sigma}.$$

В качестве краевых условий для этой системы уравнений предполагается периодичность решения по долготе, а также условие ограниченности решения на полюсах. Подстилающая поверхность как твердое тело одновременно является σ -координатной поверхностью ($\sigma = 1$). Соответствующее кинематическое условие записывается в виде:

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 1. \quad (1.4.24)$$

Аналогичное условие ставится на верхней границе атмосферы ($p = 0$):

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 0. \quad (1.4.25)$$

При $\sigma = 1$, кроме условия (1.4.24), задается также распределение геопотенциала

$$\Phi = \Phi_s = g z_s \quad \text{при} \quad \sigma = 1, \quad (1.4.26)$$

где z_s - превышение земной поверхности над уровнем моря.

Используя условия (1.4.24) и (1.4.25), можно построить уравнение для определения приземного давления p_s . Интегрирование уравнения неразрывности (1.4.22) по σ от 0 до 1 приводит к следующему уравнению:

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial p_s \bar{u}}{\partial \lambda} + \frac{\partial p_s \bar{v} \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) = 0, \quad (1.4.27)$$

где

$$(\bar{u}, \bar{v}) = \int_0^1 (u, v) d\sigma.$$

Вычитая уравнение (1.4.27) из (1.4.22) и интегрируя получившееся выражение от 1 до σ с учетом краевого условия (1.4.24), можно получить следующее диагностическое соотношение для аналога вертикальной скорости $\dot{\sigma}$:

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{a \cos \varphi p_s} \int_{\sigma}^1 \left(\frac{\partial p_s u'}{\partial \lambda} + \frac{\partial p_s v' \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) d\sigma, \quad (1.4.28)$$

где $(u', v') = (u - \bar{u}, v - \bar{v})$.

1.5. Разделение масштабов и региональные модели

Если рассмотреть первые два уравнения системы (1.3.7) для горизонтальных компонент скорости, то можно ввести безразмерный параметр, определяющий отношение адвективного ускорения $\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}$ к силе Кориолиса $2\vec{\Omega} \times \vec{u}$:

$$\varepsilon = \left[\frac{\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}}{2\vec{\Omega} \times \vec{u}} \right] \sim \frac{U^2 / L}{fU} \sim \frac{U}{fL} \sim 10^{-1}.$$

Эта величина называется числом Россби-Кибеля

$$\text{Ro} = \frac{U}{fL} \quad (1.5.1)$$

и является малым параметром для крупномасштабных движений, для которых вращение Земли существенно. Эти движения определены как невязкие геофизические течения, свойства которых описываются разложением уравнений системы (1.3.7) по малому параметру ε . Нулевому приближению этих уравнений соответствует строгое равенство

$$2\vec{\Omega} \times \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (1.5.2)$$

Уравнение (1.5.2) означает баланс сил Кориолиса и градиента давления для горизонтальных составляющих скорости $\vec{u}$. В покомпонентной записи выражения для горизонтальных скоростей выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} u &= -\frac{1}{f \rho a} \frac{\partial p}{\partial \varphi}, \\ v &= \frac{1}{f \rho a \cos \lambda} \frac{\partial p}{\partial \lambda}. \end{aligned} \quad (1.5.3)$$

Формулы (1.5.3) представляют собой соотношения геострофического ветра, которые для крупномасштабных движений атмосферы в средних широтах выполняются с точностью примерно 10%. В геострофическом приближении ветер направлен по касательным к изобарам, оставляя в северном полушарии высокое значение давления справа. Из (1.5.3) видно, что соотношения геострофического ветра неприменимы для экваториальной динамики. Следует заметить, что геострофические соотношения как нулевое приближение

являются диагностическими и не могут служить основой для исследования динамики процесса, которые реализуются через малые агеострофические компоненты и которые можно оценивать через разложение исходной системы (1.3.7) по малому числу Россби-Кибеля.

Табл. 1.5.1. Классификации атмосферных процессов по пространственно-временным масштабам.

Горизон- тальный масштаб	Время жизни	Пространственно-временной масштаб по различным классификациям				Атмосферные явления/процессы
		Хромов, Петросянц (2004)	Pielke (2002)	Orlanski (1975)	Thunis, Bornstein (1996)	
> 10 тыс. км	~ 1 мес.	глобальный	синоптиче- ский	макро-α	макро-α	Элементы общей циркуляции атмосферы, инерционные волны
2-10 тыс. км	1 нед. - 1 мес.	синопти- ческий		макро-β	макро-β	Циклоны, антициклоны
200-2000 км	1 сут. - 1 нед.			мезо-α	макро-γ	Фронты, тропические циклоны
20-200 км	1 ч — 1 сут.	мезо	мезо	мезо-β	мезо-β	Низкоуровневые струйные течения, скопления кучево- дождевых облаков, горные ветры и волны, морской бриз
2-20 км	~ 1 ч	конвектив- ных облаков	микро	мезо-γ	мезо-γ	Кучево-дождевые облака, «турбулентность ясного неба», гравитационные волны, городская циркуляция
200 м — 2 км	30 мин - 1 ч	микро		микро-α	мезо-δ	Кучевые облака, торнадо
20-200 м	1- 30 мин			микро-β	микро-β	Термики, смерчи
2-20 м	1 с — 1 мин			микро-γ	микро-γ	Турбулентность
< 2 м	< 1 с				микро-δ	Турбулентность, акустические волны

Наблюдения показывают, что в атмосфере развиваются процессы, охватывающие

широкий диапазон пространственных и временных масштабов. На ранних этапах создания сети станций регулярных наземных наблюдений метеорологии, до XIX в., наблюдатели *in situ* могли фиксировать только процессы и явления масштабом до нескольких километров (именуемым иногда масштабом кучевых облаков), например, облака различных типов. С поступлением данных измерений регулярной наземной сети и построением на их основе так называемых синоптических карт, стала накапливаться информация о процессах синоптического (например, циклоны, антициклоны) и планетарного (в частности, западный перенос в средних широтах, циркуляция пассатов) масштабов. При этом разрешение наблюдательной сети долгое время оставалось недостаточным для отражения процессов мезомасштаба – промежуточного между синоптическим и масштабом конвективных облаков. Данные о пространственной структуре мезомасштабных процессов стали доступны только после внедрения в практику наблюдений метеорологических радиолокаторов (конец 40-х гг. XX в.) и спутников (60-е гг. XX в.). Приведенные выше названия масштабов заимствованы из книги (Хромов и Петросянц, 2004). Были предложены и другие классификации масштабов атмосферных процессов (см. табл. 1.5.1), среди которых наиболее популярной стала классификация Орланского (Orlansky, 1975). Целесообразно рассмотреть в связи с этим вопрос о критериях разделения масштабов атмосферных процессов.

Динамический критерий разделения масштабов. Согласно этому критерию, в качестве границ масштабов атмосферных процессов можно использовать пределы применимости гидростатического и геострофического приближений. Для оценки границ справедливости геострофического приближения следует принять во внимание, что число Россби-Кибеля должно удовлетворять ограничению:

$$Ro = \frac{U}{fL} < \alpha ,$$

где α - малое число, например, 10^{-1} . Если взять в качестве характерной горизонтальной скорости $U = 10$ м/с, то получится $L > 1000$ км, что и является нижней границей применимости геострофического соотношения в терминах горизонтального масштаба атмосферного образования.

В силу уравнения неразрывности $U/L \sim W/H$. Если теперь обратиться к уравнению вертикального движения – третьему уравнению системы (1.3.7), записанному для простоты в несколько упрощенном виде:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) w = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g , \quad (1.5.4)$$

то его левую часть можно оценить выражением HU^2 / L^2 . Тогда условием применимости гидростатического приближения может служить неравенство

$$\frac{HU^2}{L^2 g} < \alpha \text{ или } L > U \sqrt{\frac{H}{\alpha g}} ,$$

так что при прежних значениях параметров и $g \approx 10 \text{ м/с}^2$ имеет место оценка $L > 1$ км, что является, в свою очередь, нижней границей применимости гидростатического приближения.

Следует, однако, подчеркнуть приблизительность этой оценки. Так, например, уравнение (1.5.4) можно переписать в приближении Буссинеска (см. ниже):

$$\frac{\partial w}{\partial t} + (\bar{u} \nabla) w = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial z} + g \frac{\theta'}{\theta_0}, \quad (1.5.5)$$

так что аналогичная предыдущему оценка приводит к другому выражению:

$$L > U \sqrt{\frac{H\theta_0}{\Theta \alpha g}},$$

где Θ - характерный масштаб отклонения потенциальной температуры θ' от некоторого «стандартного» значения $\theta_0 \approx 300$ К. Если Θ принять равным 3 К, то получается оценка $L > 10$ км. Эта оценка лучше согласуется с опытом численного моделирования кучевых облаков (размером от нескольких километров и более), согласно которому вертикальным ускорением в таких образованиях пренебрегать нельзя.

В табл. 1.5.2 перечислены атмосферные процессы, ранжированные в соответствии с динамическим критерием разделения масштабов, для которых с уверенностью можно использовать (символ +) или не использовать (знак –) то или иное приближение, а также процессы, которые требуют специального рассмотрения (символ $\pm$).

Табл. 1.5.2. Масштабы атмосферных процессов согласно динамическому критерию разделения масштабов.

Масштабы атмосферных процессов	Применимость геострофического приближения	Применимость гидростатического приближения	Горизонтальный масштаб	Масштабы по классификации Орланского
Макромасштабные процессы	+	+	>1000 км	макро- α , макро- β
Мезомасштабные процессы	–	$\pm$	1–1000 км	мезо- α , мезо- β , мезо- γ
Микромасштабные процессы	–	–	< 1 км	микро- α , микро- β , микро- γ

Спектральный критерий разделения масштабов. Помимо приведенных выше динамических соображений, обосновывающих выделение интервалов пространственных масштабов атмосферных процессов, существует также спектральный критерий. В качестве объекта рассмотрения в этом критерии служит функция спектральной плотности скорости или какой-либо скалярной характеристики атмосферного потока (например, температуры). Поскольку специфика наблюдений в атмосфере заключается в том, что измеряются, как правило, временные ряды в фиксированных в пространстве точках, то функция спектральной плотности выражается как функция частоты или периода. Исключением являются данные радиолокации или спутниковые изображения. Скорость, однако, может быть восстановлена по спутниковым данным с невысокой точностью, а радарные данные отличает относительно небольшой охват территории (круг радиусом 100–200 км).

Перейти от временного спектра к пространственному можно, применив гипотезу «замороженной турбулентности» Тейлора, т. е. заменяя частоту волновым числом через соотношение $\omega = Uk$, где ω – частота, k – волновое число в направлении потока, U – средняя скорость потока в точке измерений. Но такой подход применим для анализа пространственного спектра в небольшой окрестности точки измерений, поскольку пространственные структуры не успевают сильно измениться за время пересечения этой окрестности. Это также означает, что в таком пространственном спектре будут отражены только достаточно короткие волны, длина которых значительно меньше радиуса указанной

окрестности. Учитывая эти ограничения, эффективным источником данных для построения пространственных спектров стали поля, полученные по расчетам численных гидротермодинамических моделей атмосферы и океана.

При анализе спектра обращают внимание на экстремумы функции спектральной плотности, а также на наклон функции в логарифмических координатах. На рис. 1.5.1 представлена построенная по эмпирическим данным функция спектральной плотности $E(\omega)$ из работы Ван дер Ховена (van der Hoven, 1957).

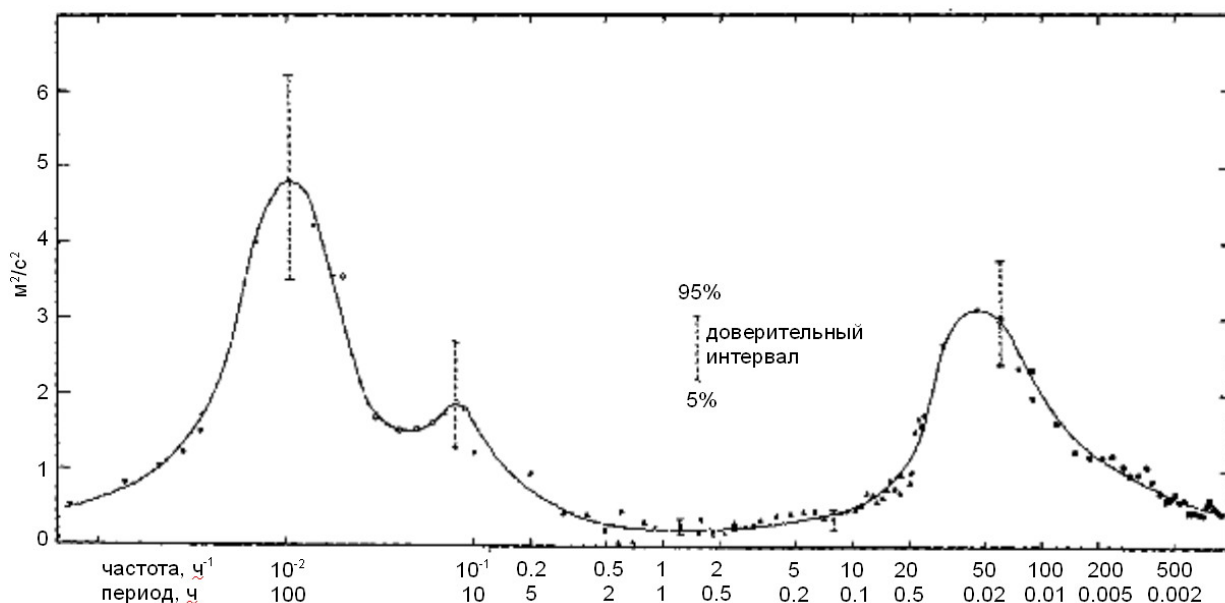


Рис. 1.5.1. Функция спектральной плотности горизонтальной скорости ветра, измеренной на высотах 91 и 125 м в Национальной обсерватории Брукхафена. По оси абсцисс отложен $\ln \omega$, по оси ординат – $\omega E(\omega)$, так что площадь под графиком равна кинетической энергии, заключенной в соответствующем интервале частот.

Как видно из рисунка, на графике присутствуют два основных максимума (соответствующие периодам 4 сут и ~ 100 с) и один максимум меньшей величины (12 ч). Первый максимум соответствует синоптической изменчивости, второй — турбулентности пограничного слоя атмосферы. В измерениях, полученных на меньших высотах, вместо 12-часового максимума проявляется 24-часовой. Обращает на себя внимание «спектральный провал» - интервал 1-0.1 ч⁻¹, в котором значения функции спектральной плотности минимальны. Этот интервал периодов соответствует масштабу кучевых облаков (мезо-γ в классификации Орланского). Таким образом, макро-, микро- и мезомасштаб отчетливо выделяются в спектрах метеорологических величин и, следовательно, форма спектра может выступать в качестве критерия выделения этих масштабов. Важно отметить, что различные участки спектра на рис. 1.5.1 получены из временных рядов, охватывающих различные временные интервалы.

Региональные и мезомасштабные модели. Исторически, в силу необходимости фильтрации малозначащих для прогноза погоды метеорологических шумов, региональные модели строились в гидростатическом приближении и, по мере развития климатических моделей, становились «клонами» крупномасштабных атмосферных моделей. Пространственный шаг сетки в таких моделях составлял несколько десятков километров, а область расчета покрывала значительную часть поверхности Земли, занимающую материк или крупную часть материка с окружающими акваториями океанов (например, Западная Европа, Восточно-Европейская равнина, Сибирь). Такая модель, создана, например, в Главной геофизической обсерватории им. А.И. Воейкова (Школьник и др., 2000) и в ней использована полная система уравнений гидротермодинамики в

гидростатическом приближении, записанная в σ -системе координат.

Мезомасштабные модели изначально разрабатывались для воспроизведения мезометеорологических процессов, которые, согласно классификации Орланского (Orlansky, 1975), имеют горизонтальные масштабы от 2 до 2000 км. Как правило, в этих моделях (обзор некоторых из них приведен в публикации Вельтищева и Степаненко, 2007) используется негидростатическая форма уравнений движения, а горизонтальное разрешение составляет 10 км и менее. В частности, широкое распространение получила модель для исследования и прогноза погоды WRF (Weather Research and Forecast), разработанная в Национальном центре атмосферных исследований США (Janjic et al., 2001). В настоящее время отчетливо проявляется сближение региональных и мезомасштабных моделей, главным образом, за счет отказа первых от гидростатического приближения и перехода к мезомасштабному разрешению. В качестве примера использования такого подхода можно сослаться на проекты международного консорциума по мезомасштабному моделированию COSMO (Consortium for small-scale modeling, <http://www.cosmo-model.org>).

В системе уравнений гидротермодинамики атмосферы, принятой в современных мезомасштабных моделях, часто используется представление термодинамических переменных в виде суммы фоновой величины, характеризующей некоторое основное (например, синоптическое) состояние, и отклонения, обусловленного мезомасштабной циркуляцией. Это – так называемое приближение Буссинеска, в котором отклонения термодинамических величин от фоновых предполагаются малыми. Главная идея этого приближения заключается в том, что зависимость плотности от других термодинамических переменных учитывается лишь в одном слагаемом уравнений движения, а именно, в слагаемом с объемной силой $\rho \vec{g}$. В остальных же слагаемых, куда входит плотность, предполагается, что $\rho = \text{const}$. Принимается, что фоновые величины удовлетворяют уравнению квазистатики.

Для иллюстрации данного подхода целесообразно привести вывод соответствующих уравнений модели NH3d (Miranda, 1990), разработанной в университете г. Рединга (Великобритания) и развиваемой в настоящее время в Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ им. М.В. Ломоносова на основе суперкомпьютерной реализации. Вывод системы уравнений этой мезомасштабной модели в декартовой (x, y, z) системе координат удобно начать с первого уравнения движения:

$$\frac{du}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + f_v + F_u. \quad (1.5.6)$$

Вводится новая вертикальная координата

$$\sigma = \frac{p - p_t}{p_*}, \quad (1.5.7)$$

где $p_* = p_s - p_t$, p_s – приземное давление, $p_t = \text{const}$ – давление на верхней границе области определения зависимых переменных. Предполагается, что существуют фоновые состояния Φ_b для геопотенциала Φ , θ_b – для потенциальной температуры θ и ρ_b – для плотности ρ , причем любую из термодинамических переменных можно представить в виде: $\psi = \psi_b(p) + \psi'$, $|\psi' / \psi_b| \ll 1$ ($\psi = \Phi, \theta, \rho$).

На p -поверхностях $\partial p / \partial x_p = 0$, но с другой стороны

$$\frac{\partial p}{\partial x_p} = \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x_p}.$$

Согласно идее приближения Буссинеска, здесь принимается, что $\partial p / \partial z = -g\rho$, и, следовательно

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial x_p}. \quad (1.5.8)$$

Поскольку фоновые распределения зависят только от давления, то из (1.5.8) следует (приближенное равенство заменено точным), что

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\partial \Phi'}{\partial x_p}. \quad (1.5.9)$$

Далее

$$\frac{\partial \Phi'}{\partial x_p} = \frac{\partial \Phi'}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x_p} = \frac{\partial \Phi'}{\partial x_\sigma} - \frac{\sigma}{p} \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \frac{\partial p}{\partial x_\sigma}, \quad (1.5.10)$$

где использовано определение σ ($p = \sigma p_* + p_t$) и соотношение $\partial p / \partial x_p = \partial p / \partial x_\sigma$. Для дальнейшего преобразования уравнения движения понадобится уравнение неразрывности в σ -системе координат. Уравнения неразрывности в z -системе координат выглядит следующим образом:

$$\frac{d \ln \rho}{dt} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0.$$

Пользуясь преобразованиями

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x},$$

$$\frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y_\sigma} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y},$$

определением вертикальной скорости

$$w \equiv \frac{dz}{dt} = \frac{\partial z}{\partial t_\sigma} + u \frac{\partial z}{\partial x_\sigma} + v \frac{\partial z}{\partial y_\sigma} + \dot{\sigma} \frac{\partial z}{\partial \sigma}$$

и равенством

$$\frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z},$$

после несложных выкладок можно получить искомую форму уравнения

$$\frac{d \ln \rho}{dt} + \frac{d}{dt} \ln \left(\frac{\partial z}{\partial \sigma} \right) + \frac{\partial u}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial v}{\partial y_\sigma} + \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = 0. \quad (1.5.11)$$

Чтобы избавиться в этом уравнении от плотности, необходимо привлечь уравнение гидростатики

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -g\rho.$$

Логарифмируя его, дифференцируя по t и учитывая, что $\partial p / \partial z = p_* \partial \sigma / \partial z$, можно получить соотношение:

$$\frac{d}{dt} \ln \left(\frac{\partial z}{\partial \sigma} \right) = \frac{d \ln p_*}{dt} - \frac{d \ln \rho}{dt}. \quad (1.5.12)$$

После подстановки (1.5.12) в (1.5.11) и использования известных правил дифференцирования, уравнение неразрывности в σ -системе координат принимает следующий дивергентный вид:

$$\frac{\partial p_*}{\partial t} + \frac{\partial p_* u}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial p_* v}{\partial y_\sigma} + \frac{\partial p_* \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = 0. \quad (1.5.13)$$

Это уравнение позволяет представить адвективные слагаемые в уравнениях для компонент скорости и переноса скаляров в дивергентном виде, что, в свою очередь, упрощает построение консервативной конечно-разностной схемы для решения этих уравнений. Умножая исходное уравнение движения (1.5.6) на p_* , пользуясь (1.5.9), (1.5.10) и (1.5.13), первое уравнение движения можно следующим образом записать в приближении Буссинеска в σ -системе координат (для краткости записи нижние индексы σ опущены):

$$\frac{\partial p_* u}{\partial t} + \frac{\partial p_* u^2}{\partial x} + \frac{\partial p_* v u}{\partial y} + \frac{\partial p_* \dot{\sigma} u}{\partial \sigma} = -p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial x} + \sigma \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \frac{\partial p_*}{\partial x} + p_* f v + p_* F_u. \quad (1.5.14)$$

Аналогичные преобразования второго уравнения движения

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - f u + F_v,$$

приводят к уравнению

$$\frac{\partial p_* v}{\partial t} + \frac{\partial p_* u v}{\partial x} + \frac{\partial p_* v^2}{\partial y} + \frac{\partial p_* \dot{\sigma} v}{\partial \sigma} = -p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial y} + \sigma \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \frac{\partial p_*}{\partial y} - p_* f u + p_* F_v. \quad (1.5.15)$$

Третье уравнение движения

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + F_w \quad (1.5.16)$$

преобразуется следующим образом. Дифференцирование (1.5.7) по z дает $\partial p / \partial z = p_* \partial \sigma / \partial z$. Далее, если ввести параметр $\varepsilon = g^{-1} dw / dt$, то с его помощью уравнение (1.5.16) переписывается в виде

$$(1 + \varepsilon)g = -\frac{p_*}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial z} + F_w.$$

Теперь, поскольку $\partial \sigma / \partial z = (\partial z / \partial \sigma)^{-1}$ и $\Phi = \Phi_b(p) + \Phi'$, то

$$(1 + \varepsilon) \left(\frac{\partial \Phi_b}{\partial \sigma} + \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \right) = -\frac{p_*}{\rho} + \frac{1}{g} \left(\frac{\partial \Phi_b}{\partial \sigma} + \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \right) F_w.$$

Раскрывая скобки в левой части и применяя уравнение гидростатики $\partial \Phi_b / \partial \sigma = -p_* / \rho_b$, можно получить следующее соотношение:

$$-\varepsilon \frac{p_*}{\rho_b} = -(1 + \varepsilon) \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} - \frac{p_*}{\rho} + \frac{p_*}{\rho_b} + \left(-\frac{p_*}{g \rho_b} + \frac{1}{g} \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} \right) F_w,$$

откуда, в силу определения ε в левой части, после преобразования второго и третьего слагаемых в правой, а также пренебрежения величиной $g^{-1} \partial \Phi' / \partial \sigma$, следует

$$\frac{1}{g} \frac{dw}{dt} \frac{p_*}{\rho_b} = (1 + \varepsilon) \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} - p_* \left(\frac{\rho'}{\rho_b \rho} \right) + \frac{p_*}{g \rho_b} F_w. \quad (1.5.17)$$

Поскольку относительное отклонение реальной плотности от фоновой в атмосфере невелико, то в знаменателе второго слагаемого правой части можно положить $\rho = \rho_b = p / RT_b$ (использовано уравнение состояния идеального газа). Кроме того, можно пренебречь ε в правой части, что физически означает, что ускорение воздушной частицы очень мало в сравнении с g (более подробное обоснование этому см. в Miller and White, 1984).

Далее, согласно приближению Буссинеска $\rho' / \rho_b \approx -\theta' / \theta_b$, так что уравнение (1.5.17) принимает вид

$$p_* \frac{dw}{dt} = \frac{gp}{RT_b} \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} + gp_* \frac{\theta'}{\theta_b} + p_* F_w. \quad (1.5.18)$$

Однако, как будет видно несколько позже, это уравнение удобно переписать в терминах приближенной вертикальной скорости:

$$\tilde{w} \equiv \frac{1}{g} \frac{d\Phi_b}{dt} = \frac{1}{g} \frac{\partial \Phi_b}{\partial p} \frac{dp}{dt} = -\frac{\tau}{g \rho_b}, \quad (1.5.19)$$

где $\tau \equiv dp / dt$. Вертикальное ускорение в (1.5.18) можно представить следующим образом

$$\frac{dw}{dt} = \frac{1}{g} \frac{d}{dt} \left(\frac{d\Phi_b}{dt} + \frac{d\Phi'}{dt} \right) = \frac{d\tilde{w}}{dt} + \frac{1}{g} \frac{d^2 \Phi'}{dt^2} \approx \frac{d\tilde{w}}{dt}.$$

Обоснование незначимости второй производной возмущения геопотенциала можно найти в уже упомянутой выше статье (Miller and White, 1984). Теперь, как и в двух других уравнениях движения, левую часть целесообразно привести к дивергентному виду. С этой целью для удобства записи вводится обозначение $S = gp / (RT_b p_*)$ и окончательный вид третьего уравнения движения для приближенной вертикальной скорости принимает следующий вид:

$$\frac{\partial p_* \tilde{w}}{\partial t} + \frac{\partial p_* u \tilde{w}}{\partial x} + \frac{\partial p_* v \tilde{w}}{\partial y} + \frac{\partial p_* \dot{\sigma} \tilde{w}}{\partial \sigma} = S p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} + g p_* \frac{\theta'}{\theta_b} + p_* F_w. \quad (1.5.20)$$

Система из четырех уравнений (1.5.13), (1.5.14), (1.5.15) и (1.5.20) содержит 7 неизвестных: p_* , u , v , $\tilde{w}$, $\dot{\sigma}$, θ' и Φ' . Так же, как и в разделе 1.4, можно записать кинематическое условие:

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 1 \quad (1.5.21)$$

и условие на верхней границе модельной области ($p = p_t$):

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 0. \quad (1.5.22)$$

Интегрируя (1.5.13) по σ от 0 до 1 и используя условия (1.5.21) и (1.5.22), выводятся уравнения для определения p_*

$$\frac{\partial p_*}{\partial t} + \frac{\partial p_* \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial p_* \bar{v}}{\partial y} = 0 \quad (1.5.23)$$

и далее, аналогично тому, как было выведена формула (1.4.28), получается диагностическое соотношение для аналога вертикальной скорости $\dot{\sigma}$:

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{p_s} \int_{\sigma}^1 \left(\frac{\partial p_s u'}{\partial x} + \frac{\partial p_s v'}{\partial y} \right) d\sigma, \quad (1.5.24)$$

где по-прежнему

$$(\bar{u}, \bar{v}) = \int_0^1 (u, v) d\sigma, \quad (u', v') = (u - \bar{u}, v - \bar{v}).$$

Уравнение притока тепла целесообразно вначале рассмотреть без источников:

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{d\theta_b}{dt} + \frac{d\theta'}{dt} = \tau \frac{\partial \theta_b}{\partial p} + \frac{d\theta'}{dt} = -\frac{\tilde{w} g \rho_b}{p_*} \frac{\partial \theta_b}{\partial \sigma} + \frac{d\theta'}{dt} = -S \tilde{w} \frac{\partial \theta_b}{\partial \sigma} + \frac{d\theta'}{dt} = 0.$$

Здесь учтены свойства фонового состояния, определения $\tilde{w}$ и S . После умножения на p_* и преобразования адвективных слагаемых, окончательно имеет место:

$$\frac{\partial p_* \theta'}{\partial t} + \frac{\partial p_* u \theta'}{\partial x} + \frac{\partial p_* v \theta'}{\partial y} + \frac{\partial p_* \dot{\sigma} \theta'}{\partial \sigma} = S p_* \tilde{w} \frac{\partial \theta_b}{\partial \sigma}.$$

С учетом источников тепла Q и параметризации процессов подсеточных масштабов, это уравнение принимает следующий вид:

$$\frac{\partial p_* \theta'}{\partial t} + \frac{\partial p_* u \theta'}{\partial x} + \frac{\partial p_* v \theta'}{\partial y} + \frac{\partial p_* \dot{\sigma} \theta'}{\partial \sigma} = S p_* \tilde{w} \frac{\partial \theta_b}{\partial \sigma} + \frac{\theta}{T} p_* Q. \quad (1.5.25)$$

Для того чтобы замкнуть систему, необходимо иметь уравнение для определения Φ' . Дифференцируя уравнение (1.5.14) по x , уравнение (1.5.15) – по y , складывая получившиеся выражения и вычитая из этой суммы продифференцированное по t уравнение (1.5.13), можно в результате выписать следующее эллиптическое уравнение

$$\frac{\partial^2 \Phi'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi'}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[S^2 + \frac{\sigma^2}{p_*^2} (\nabla p_*)^2 \right] \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} - \frac{\sigma}{p_*} \Delta p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} = \Re, \quad (1.5.26)$$

правая часть которого $\Re$ не зависит от Φ' .

Турбулентный пограничный слой. Использование приближения Буссинеска оказалось полезным при исследовании многих геофизических процессов. Поскольку температура рассматриваемой среды считается мало отклоняющейся от некоторого характерного для нее среднего значения T_0 , то выражение для зависимости плотности от температуры можно представить в виде:

$$\rho(T) = \rho(T_0) + \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{T=T_0} (T - T_0). \quad (1.5.27)$$

Если ввести коэффициент теплового расширения

$$\lambda = - \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{T=T_0},$$

то формулу (1.5.27) можно переписать в виде

$$\rho(T) = \rho_0 \left[1 - \frac{\lambda}{\rho_0} (T - T_0) \right]. \quad (1.5.28)$$

Считается, что плотности ρ_0 соответствует некоторое гидростатическое распределение давления $p_0(z)$, удовлетворяющее уравнению

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial z} = -g. \quad (1.5.29)$$

Согласно (1.5.28), плотность среды мало отличается от ее характерного значения ρ_0 , что позволяет записать уравнения гидротермодинамики несжимаемой среды в приближении Буссинеска следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} &= -\nabla \pi + b \vec{n} - f \vec{n} \times \vec{u} + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{F}, \\
\frac{\partial b}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) b &= \chi \nabla^2 b + Q_b, \\
\nabla \cdot \vec{u} &= 0,
\end{aligned}
\tag{1.5.30}$$

где $\vec{n} = (0, 0, 1)^T$, $b = -g(\rho - \rho_0) / \rho_0$ - плавучесть, а $\pi = (p - p_0) / \rho_0$. Для атмосферного пограничного слоя, например, $b = \alpha \theta'$, где $\alpha = g / \theta_0$. Если взять оператор дивергенции от обеих частей первого из уравнений (1.5.30) и воспользоваться тем, что в силу уравнения неразрывности $\nabla \cdot \partial \vec{u} / \partial t = 0$, то можно получить следующее диагностическое соотношение

$$\nabla^2 \pi = \rho_0 \nabla \left[\nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{F} - (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + b \vec{n} - f \vec{n} \times \vec{u} \right]. \tag{1.5.31}$$

Критерии подобия. При разработке теоретических моделей и анализе результатов лабораторного или численного моделирования часто пользуются критериями подобия – безразмерными величинами, характеризующими соотношения различных сил, действующих в жидкости или газе. Большая их часть была получена в гидромеханике и впоследствии применена в геофизических задачах. Другие же образованы с учетом геофизических процессов и отличаются от критериев подобия, принятых в гидромеханике, использованием размерных констант, характерных для Земли. В динамике дозвуковых потоков (со скоростями, меньше скорости звука) основные критерии подобия базируются на числах Рейнольдса Re , Фруда Fr и Струхала St .

Число Рейнольдса определяется соотношением

$$Re = \frac{UL}{\nu}, \tag{1.5.32}$$

которое характеризует отношение сил инерции и трения. В турбулентных течениях $Re \gg 1$ и адвекция доминирует, что свидетельствует о преобладающем влиянии нелинейной динамики и хаотической эволюции. Типичные значения молекулярной вязкости ν равны $1.5 \times 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ для воздуха и $1 \times 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ для воды. Эти значения достаточно малы, чтобы при типичных значениях скорости U обеспечить $Re \gg 1$ на всех пространственных масштабах L от микромасштаба (порядка 1 мм) до планетарного (порядка 10^4 км). При $U = 1 \text{ м/с}$ и $L = 10^3 \text{ м}$ число Рейнольдса лежит в диапазоне от 10^9 до 10^{10} . Вместе с тем, необходимо подчеркнуть, что имеется существенная разница в решениях уравнений Навье-Стокса при $Re \rightarrow \infty$ и в случае уравнений Эйлера ($\nu = 0$, т.е. $Re = \infty$) в силу того, что диссипация контролирует процессы преобразования энергии турбулентного течения.

Во вращающихся жидкостях (в том числе, в атмосфере и океане) в качестве критерия подобия может использоваться число Тэйлора

$$Ta = \frac{2\Omega_0 L^2}{\nu}, \tag{1.5.33}$$

характеризующее соотношение между силой инерции и силой трения.

Число Фруда

$$Fr = \frac{U^2}{gL} \quad (1.5.34)$$

характеризует относительную роль сил инерции и тяжести и применяется наиболее часто при исследовании обтекания жидкостью различных тел. Под скоростью U здесь обычно понимается скорость невозмущенного потока вдали от препятствия, а под L – масштаб явления (например, высоту препятствия). Для стратифицированной жидкости используется модифицированное число Фруда

$$Fr = \frac{b_0 U^2}{\Delta b g L}, \quad (1.5.35)$$

где Δb – перепад плавучести между верхней и нижней границами потока, а b_0 – среднее значение плавучести. В качестве параметра стратификации может быть использован вертикальный градиент плавучести, так что число Фруда приобретает вид:

$$Fr = \frac{U^2}{gL^2} \left(\frac{1}{b_0} \frac{\partial b}{\partial z} \right)^{-1}. \quad (1.5.36)$$

Число Струхала вычисляется по формуле

$$St = \frac{L}{UT}, \quad (1.5.37)$$

где T – некоторый интервал времени, а произведение UT называют адвективным масштабом длины. Этот критерий, характеризующий отношение масштаба длины к адвективному масштабу, используется для описания неустановившегося движения жидкости, например, колебательного, для которого в качестве времени T можно использовать период. Число Россби-Кибеля Ro (1.3.16) является фактически переформулировкой числа Струхала, в которой вместо периода T используется частота.

Относительная роль адвекции и диффузии в переносе плавучести (а также пассивной примеси) может быть охарактеризована числом Пекле

$$Pe = \frac{UL}{\chi}, \quad (1.5.38)$$

которое является аналогом числа Рейнольдса для примеси. При больших числах Пекле доминируют процессы адвекции, но решение уравнений Навье-Стокса при $Pe \rightarrow \infty$ существенно отличается от случая $Pe = \infty$ в силу того, что диффузия контролирует процесс удаления мелкомасштабных структур в поле примеси.

Относительная роль диссипации и диффузии характеризуется числом Прандтля

$$Pr = \frac{\nu}{\chi}. \quad (1.5.39)$$

Если ввести временной масштаб диссипации $T_\nu = L^2 / \nu$ и диффузии $T_\chi = L^2 / \chi$, то число Прандтля можно выразить в виде отношения этих двух масштабов: $Pr = T_\nu / T_\chi$. Это число

является характеристикой среды, а не конкретного течения. Для воздуха и воды его значения равны 0.7 и 12.2, соответственно.

Взаимная роль плавучести и диффузии определяется числом Рэлея

$$Ra = \frac{L^3 \Delta b}{\chi \nu}. \quad (1.5.40)$$

При конвекции движения в жидкости генерируются за счет неустойчивой вертикальной стратификации плотности ($\partial b / \partial z < 0$). Число Рэлея представляет собой отношение временных масштабов диффузии $T_\chi = L^2 / \chi$ и плавучести $T_b = (L / \Delta b)^{1/2}$, где масштаб плавучести Δb есть разность в ее значениях, поддерживаемых внешними источниками на границах слоя толщины L . Если конвекция поддерживается разностью температур ΔT , то $\Delta b = g \alpha \Delta T$, где α – коэффициент термического расширения жидкости или газа. Конвекция начинается, если $T_\chi \gg T_b$, т.е. если $Ra \gg 1$ (диффузия происходит слишком медленно, чтобы существенно повлиять на плавучесть частиц воды или газа при их подъеме).

Соотношение между силами плавучести и инерции выражается градиентным числом Ричардсона

$$Ri = \frac{\partial b / \partial z}{|\partial \bar{u} / \partial z|^2}. \quad (1.5.41)$$

В случае устойчивой плотностной стратификации ($\partial b / \partial z > 0$) вертикальные движения выражены слабо, но турбулентность может все же существовать, если имеется достаточно энергии за счет поля горизонтальной скорости. Полезным для оценки течения в этих условиях параметром является отношение временного масштаба плавучести $T_b = (L / \Delta b)^{1/2} = (\partial b / \partial z)^{-1/2}$ и характерного времени инерции за счет сдвига горизонтальной скорости $T_i = L / U = |\partial \bar{u} / \partial z|^{-1}$, причем $Ri = (T_i / T_b)^2$. Если $Ri \ll 1$, то плавучестью можно пренебречь в уравнениях движения и ее можно рассматривать как пассивную примесь без обратного влияния на динамику.

Режимы турбулентности. В атмосфере и океане реализуются разнообразные комбинации физических условий, при которых возникает турбулентность, проявляющаяся в виде различных ее режимов (McWilliams, 2006):

1. однородная пространственно изотропная турбулентность с $b = 0$ и $f = 0$;
2. геострофическая турбулентность, возникающая в присутствии вращения и устойчивой стратификации при $Ro \sim Ri^{-1/2}$ и $Ro \leq 1$. Этот режим включает также случаи, связанные с пространственной изменчивостью силы Кориолиса ($\beta = \partial f / \partial y$) и с рельефом;
3. сдвиговая турбулентность, обусловленная сдвигом среднего потока $\nabla \bar{u}$;
4. стратифицированная турбулентность в присутствии наложенной на поток (устойчивой) стратификации плотности (а значит, и плавучести) при $Ri \geq 1$;
5. конвекция при неустойчивой стратификации плавучести в среднем потоке ($\partial \bar{b} / \partial z < 0$) и $Ra \geq 1$;
6. турбулентность в пограничном слое, располагающемся вблизи твердой (подстилающей) поверхности, через которую отсутствует перенос массы, но есть поток импульса и/или поток плавучести (этот режим может проявляться в виде сдвиговой, стратифицированной или конвективной турбулентности, но

контролирующие его параметры определяются граничными условиями на подстилающей поверхности);

7. волновая турбулентность, возникающая в присутствии слабо нелинейных волн: поверхностные или внутренние гравитационные волны, инерционные волны, волны Россби и т.д. с $ak \ll 1$ и $Uk \ll 1$, где a – амплитуда волны и (ω, k) – частота и волновое число.

Уравнения (1.5.30) обладают рядом симметрий, т.е. не меняют свой вид при определенных заменах переменных. С их помощью также полезно классифицировать и интерпретировать геофизические течения. Если пренебречь на время эффектами плавучести и вращения (положить $b=0$ и $f=0$), то математические симметрии уравнений Буссинеска выглядят следующим образом:

1. сдвиг в пространстве: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (t, \vec{x} + \delta \vec{x}, \vec{u})$;
2. сдвиг по времени: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (t + \delta t, \vec{x}, \vec{u})$;
3. преобразование Галилея: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (t, \vec{x} + t \delta \vec{u}, \vec{u} + \delta \vec{u})$;
4. поворот в пространстве: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (t, A \vec{x}, A \vec{u})$, где A – матрица вращения;
5. частичная обратимость: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (t, -\vec{x}, -\vec{u})$;
8. для консервативных систем – обратимость во времени: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (-t, \vec{x}, \vec{u})$ и масштабирование: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (\lambda^{1-n} t, \lambda \vec{x}, \lambda^n \vec{u})$;
9. для диссипативных систем – масштабирование: $(t, \vec{x}, \vec{u}) \rightarrow (\lambda^2 t, \lambda \vec{x}, \lambda^{-1} \vec{u})$.

1.6. Вихреразрешающие модели турбулентности

В геофизических течениях не наблюдаются в достаточно выраженном виде ни одна из перечисленных симметрий как из-за наличия эффектов плавучести и вращения, так и влияния несимметричных внешних возбуждающих сил и граничных условий. В качестве лабораторного аналога течения вокруг препятствия можно привести рис. 1.6.1, на котором изображены линии тока при обтекании кругового цилиндра однородным потоком для относительно малых ($Re = 0.16$) и сравнительно больших ($Re = 1.54$) чисел Рейнольдса, демонстрирующие нарушение симметрии потока при увеличении числа Re . Картина расположения линий тока на левом рисунке с трудом позволяет определить, что поток движется слева направо. Это объясняется тем, что в пределе нулевого числа Рейнольдса обтекание твердого тела обратимо и, следовательно, симметрично при симметричной форме тела. При $Re = 1.54$ картина линий тока, очевидно, уже потеряла ту симметрию передней и задней частей, которая имела место при $Re = 0.16$.

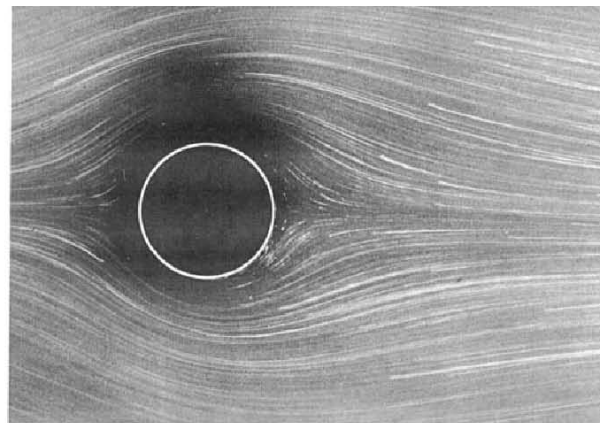
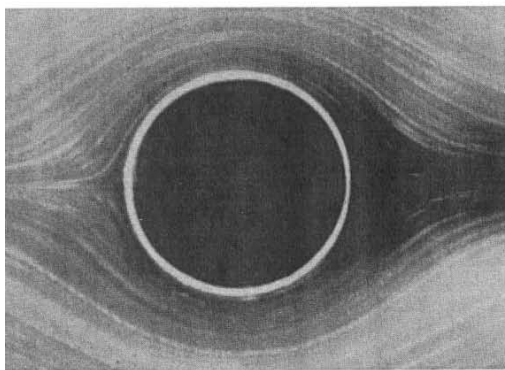


Рис. 1.6.1. Слева: симметричная картина линий тока при обтекании кругового цилиндра при $Re = 0.16$. Справа: нарушение симметрии линий тока в случае $Re = 1.54$ (Ван-Дайк, 1986).

Абстрагируясь от конкретной физической природы, турбулентность можно трактовать как процесс, который можно описать с помощью динамических систем (Кузнецов, 2001). Под динамической системой понимается математический объект, который обладает набором динамических переменных, характеризующих состояние системы, таких, что их значения в любой последующий момент времени получаются из исходного набора по определенному правилу, задающему оператор эволюции системы. Мгновенное состояние системы можно геометрически представить точкой в фазовом пространстве, а его изменение времени (динамика системы) представляется в этом пространстве фазовой траекторией. В рамках теории динамических систем был получен замечательный результат, связанный с открытием хаотической динамики. В хаотическом режиме сколь угодно малая неточность в задании начального состояния системы быстро нарастает во времени.

С теоретической точки зрения турбулентные течения представляют собой примеры нелинейных динамических систем с очень большим количеством степеней свободы. Движения в любой непрерывной среде можно описать бесконечным числом обобщенных координат, в качестве которых можно, например, принять коэффициенты разложения поля скорости по какой-либо полной системе функций от пространственных координат. В случае ламинарных движений эти координаты зачастую можно выбрать таким образом, что лишь небольшое число отвечающих им степеней свободы будет участвовать в движении. В турбулентном же движении возбужденным оказывается огромное число степеней свободы, так что изменение во времени любой физической величины описывается функциями от большого числа компонент Фурье (см. рис. 1.1.4). Практически невозможно описать индивидуальные изменения во времени всех обобщенных координат и целесообразно привлечь статистический подход, опирающийся на изучение специфических статистических закономерностей, присущих большим совокупностям однотипных объектов.

Есть определенная аналогия между статистической теорией турбулентности и кинетической теорией газов, изучающей системы из очень большого числа взаимодействующих между собой молекул. В обеих теориях точное описание эволюции исследуемой системы теоретически безнадежно, но вместе с тем имеется принципиальное различие. Оно связано с тем, что суммарная кинетическая энергия совокупности движущихся молекул не меняется во времени (при обычно принимаемых предположениях о молекулярных взаимодействиях), а при движениях реальной жидкости ее кинетическая энергия переходит в теплоту под действием вязкости. Кроме того, молекулярные ансамбли дискретны по своей природе и их временная эволюция описывается системами обыкновенных дифференциальных уравнений, в то время как в гидродинамике рассматриваются движения непрерывной среды, описываемых уравнениями в частных производных.

Общий критерий возникновения турбулентности был установлен Рейнольдсом (Reynolds, 1883) на основе соображений о подобии течений вязкой жидкости. Этот критерий заключается в том, что поток остается ламинарным до тех пор, пока число Рейнольдса не превосходит некоторого критического значения $Re = Re_{cr}$, а при $Re > Re_{cr}$ становится турбулентным. Переход к турбулентности происходит потому, что малые возмущения в ламинарном течении более не подавляются вязкостью, а начинают расти за счет энергии основного потока. Первые измерения критического числа Рейнольдса были выполнены при исследовании обтекания плоской стеклянной пластинки в первой трети прошлого века (Hansen, 1928), согласно которым $Re_{cr} \sim 3 \times 10^5 \div 5 \times 10^5$. Установлено, что значение Re_{cr} , соответствующее переходу ламинарного течения в турбулентное, оказывается тем меньше, чем больше интенсивность возмущений.

Фильтрация уравнений. Движение несжимаемой жидкости или газа можно описать системой дифференциальных уравнений Навье-Стокса. В безразмерном виде в тензорной записи эта система выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j} + F_i^e, \quad (1.6.1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1.6.2)$$

где F_i^e – сумма внешних сил, действующих на частицу жидкости. Предполагается, что решение этой системы уравнений, дополненной соответствующими граничными условиями, воспроизводит статистические характеристики потока для любых значений Re , в том числе и для развитой турбулентности с $\text{Re} > \text{Re}_{cr}$. Численным решением систем уравнений, аппроксимирующих (1.6.1) и (1.6.2) с высокой точностью, принято называть прямым численным моделированием (в англоязычной литературе – direct numerical simulation, DNS).

В практических задачах часто приходится иметь дело с потоками, характеризующимися очень большими числами Рейнольдса $\text{Re} \gg 1$. Например, для пограничного слоя атмосферы ($L \sim 10^3$ м, $U \sim 10$ м/с, $\nu \sim 10^{-5}$ м²/с) число Рейнольдса $\text{Re} \sim 10^9$. Оценки пространственного разрешения для прямого моделирования пристеночной турбулентности дают число узлов расчетной сетки $N \sim \text{Re}^{2.6}$ (см. Chapman, 1979), то есть 10^{23} точек для указанного значения Re . Поэтому DNS-подход пока остается всего лишь инструментом для детального изучения мелкомасштабной структуры турбулентности. Для проведения одного из наиболее дорогих (с точки зрения потребления компьютерных ресурсов) расчетов турбулентного потока в канале (Hoyas and Jimenez, 2005) потребовалось приблизительно 120 суток непрерывного счета на 2048 процессорах массивно параллельного компьютера Marenostum. Размеры расчетной области в продольном и поперечном направлениях были выбраны равными $8\pi h$ и $3\pi h$, соответственно (h – полуширина канала). Значение динамической скорости u_τ , характеризующей силы приповерхностного трения, в этом эксперименте оказалось ≈ 0.5 м/с. При этом число Рейнольдса, рассчитанное по скорости трения, $\text{Re}_\tau = u_\tau h / \nu$ равнялось 2003, а безразмерное время расчета $tu_\tau / h = 10.3$. Если, используя это значение, соотнести размеры области и время в упомянутом расчете с размерами области и временем для турбулентности в пограничном слое атмосферы, то получится, что этот численный эксперимент примерно соответствует моделированию движения воздуха в параллелепипеде со сторонами 100 x 38 x 8 см в продолжение 0.8 секунды.

Приемлемой альтернативой прямому численному моделированию является методология вихреразрешающего моделирования (в англоязычной литературе – large eddy simulation, LES). Наиболее распространенный подход к построению LES-модели состоит в следующем. Вводится процедура фильтрации по пространству с помощью оператора фильтрации F_Δ , определенного следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{a}(\vec{x}, t) &\equiv F_\Delta a(\vec{x}, t), \\ F_\Delta a(\vec{x}, t) &= \int_{R^3} G_\Delta(\vec{x} - \vec{x}') a(\vec{x}', t) d\vec{x}', \\ \int_{R^3} G_\Delta(\vec{x}') d\vec{x}' &= 1, \end{aligned} \quad (1.6.3)$$

где a – подлежащая фильтрации величина, $G_{\bar{\Delta}}$ – весовая функция фильтра $F_{\bar{\Delta}}$ с эффективной шириной фильтрации $\bar{\Delta}$. $G_{\bar{\Delta}}$ выбирается таким образом, чтобы фильтр подавлял преимущественно коротковолновые составляющие турбулентного движения с длинами волн $\lambda < 2\bar{\Delta}$. Необходимо заметить, что точного математического определения эффективной ширины фильтрации не существует (частные подходы к построению дискретных фильтров и методам определения их ширины можно найти, например, в работах (Lund, 1997, Vasilyev et al., 1998)). В практических приложениях для двух или трехмерной фильтрации чаще всего используется оператор, являющийся произведением дискретных аппроксимаций соответствующих одномерных фильтров. Пусть выполняются следующие свойства:

$$\frac{\partial \overline{a(\vec{x}, t)}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{a}(\vec{x}, t)}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial \overline{a(\vec{x}, t)}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{a}(\vec{x}, t)}{\partial t}, \quad (1.6.4)$$

но фильтр не обязательно должен быть идеальным, т.е., вообще говоря, $\bar{\bar{a}} \neq \bar{a}$.

Применив оператор $F_{\bar{\Delta}}$ к системе (1.6.1, 1.6.2), можно получить систему уравнений, описывающих поведение фильтрованных компонент скорости:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_i \partial x_j} + \bar{F}_i^e, \quad (1.6.5)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1.6.6)$$

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (1.6.7)$$

Здесь нелинейное слагаемое в правой части (1.6.5) формально разделено на составляющую, зависящую только от фильтрованных компонент скорости, и составляющую, включающую в себя неподдающиеся прямому моделированию исходные компоненты. Вид (1.6.7) тензора турбулентных напряжений τ_{ij} соответствует наиболее часто встречающемуся в литературе разложению фильтрованного нелинейного слагаемого на воспроизводимую явно и моделируемую (параметризуемую) составляющие (см. Leonard, 1979, Germano, 1992).

Проблема замыкания. Система уравнений (1.6.5)-(1.6.7) является незамкнутой, поскольку выражение (1.6.7) содержит исходные нефильтрованные компоненты скорости. В большинстве случаев методология вихреразрешающего моделирования предполагает замену реального тензора τ на некоторое модельное соотношение $\tau^m = \tau^m(\bar{u})$. Такие соотношения принято называть "турбулентными замыканиями" или "моделями подсеточной турбулентности".

Можно надеяться, что динамика крупномасштабных составляющих процесса, описываемого системой уравнений (1.6.5, 1.6.6), дополненной выбранным замыканием, будет статистически близка к динамике крупномасштабных составляющих исходной системы, если выполнены следующие условия.

1. Мелкомасштабные пульсации имеют универсальную структуру, не зависящую от крупномасштабных нестационарных составляющих турбулентного потока, а поведение крупных вихрей не зависит от мгновенного состояния "подсеточных" пульсаций. Тогда, при построении замыкания можно заменить мгновенные реальные "подсеточные силы" на модельные "подсеточные силы", не обязательно совпадающие с реальными, но обеспечивающие в среднем тот же обмен энергией между движениями разных масштабов

и вносящие тот же вклад в средний перенос импульса. При наличии и явном воспроизведении части инерционного интервала в трехмерном турбулентном потоке, задача построения такого замыкания упрощается. В данном случае наблюдается прямой каскад энергии в сторону мелких масштабов, а мелкомасштабные "подсеточные" вихри, будучи локально изотропными, не вносят вклада в перенос импульса. Поэтому, единственной целью "подсеточной" модели является обеспечение потерь кинетической энергии воспроизводимых явно вихрей в соответствии с каскадной передачей энергии к "подсеточной" турбулентности.

2. Подсеточные пульсации и пульсации, разрешаемые явно, имеют корреляционную связь между собой, достаточно сильную и достаточно простую, чтобы установить функциональную зависимость $\tau(\bar{u}) \approx \tau^m(\bar{\bar{u}})$.

Во многих задачах, для решения которых привлекаются LES-модели, первое предположение, наиболее оправданное при явном воспроизведении существенной части инерционного интервала, не может быть выполнено полностью в силу ограничений по пространственному разрешению. Универсальной связи между "подсеточными" и "разрешаемыми" флуктуациями пока не найдено. Название "подсеточные" утвердилось за турбулентными замыканиями благодаря тому, что, обычно, пространственный фильтр F_{Δ} , введенный на этапе дифференциальной постановки (1.6.5 -1.6.7), никоим образом не фигурирует в результирующей дискретной модели. Таким образом, полагается, что роль фильтра выполняет пространственная дискретизация с шагом Δ_g , ограничивающая спектр турбулентных пульсаций длиной волны $\lambda_g = 2\Delta_g$ (при этом считается, что $\bar{\Delta} = \Delta_g$). "Подсеточные" силы, вычисленные при помощи турбулентных замыканий, существенно зависят от энергии и структуры самых мелкомасштабных вихрей, воспроизводимых дискретной моделью. При недостаточной точности аппроксимации самых мелкомасштабных нелинейных взаимодействий мелкомасштабная структура течения будет искажена и модельные турбулентные напряжения будут вычислены с большой погрешностью. В некоторых случаях приемлемые результаты дает комбинация первого и второго подходов к построению "подсеточных" моделей. Наиболее полный обзор турбулентных замыканий и подходов к построению LES можно найти в монографии (Sagaut, 2006).

При очень больших числах Рейнольдса влиянием предпоследнего члена в уравнении (1.6.5) можно пренебречь. Следует заметить, что турбулентные замыкания с успехом применяются и для моделирования потоков с относительно небольшими числами Рейнольдса. При этом вязкие напряжения только частично воспроизводятся моделью, а замыкание играет вспомогательную роль, позволяя проводить расчеты с более грубым пространственным разрешением, чем при прямом (DNS) численном интегрировании системы (1.6.1, 1.6.2).

Методология построения LES-модели. Вихреразрешающая модель должна верно воспроизводить статистические характеристики крупномасштабных составляющих развитого турбулентного течения, ограниченного шероховатой поверхностью, при очень больших числах Рейнольдса. Все ее алгоритмы, включая численную схему и турбулентное замыкание, выбираются таким образом, чтобы обеспечить применимость модели в расчетных областях произвольной конфигурации. При этом: (i) замыкание не должно использовать априорных сведений о структуре пристеночной турбулентности; (ii) в модели не должно использоваться предположение о статистической однородности турбулентного потока в тех или иных, заранее выделенных, пространственных направлениях; (iii) модель не должна содержать параметризаций, неинвариантные относительно поворота системы координат.

Вполне естественно, что наилучшим выбором для LES являются псевдо-спектральные численные методы, наиболее точно аппроксимирующие весь спектральный диапазон. Однако, такие модели ограничены в применении в связи с невозможностью их

использования для расчетов турбулентных потоков в областях сложной конфигурации. Поэтому задача построения конечно-разностных или конечно-элементных моделей, а также разработки турбулентных замыканий, учитывающих особенности дискретизации в таких моделях остается актуальной.

Как было показано в работе (Ghosal, 1996), норма ошибок конечно-разностной аппроксимации нелинейных слагаемых в уравнении баланса импульса может превышать норму "подсеточных сил" (членов, описывающих взаимодействие крупномасштабных пульсаций скорости с движениями подсеточного масштаба). При этом для схем низкого порядка точности существенную роль играют ошибки аппроксимации, связанные с заменой производной ее конечно-разностным аналогом (Ghosal, 1996, Kravchenko and Moin, 1997). Так, для центрально-разностной аппроксимации второго порядка, спектр мощности аппроксимационных ошибок превышает спектр мощности "подсеточных" сил независимо от числа воспроизводимых гармоник, т.е. пространственного разрешения.

По мере повышения порядка аппроксимации уменьшается суммарная норма ошибок, а спектральный интервал, на котором их спектр мощности превышает спектр мощности "подсеточных сил", сужается (диапазон, в котором ошибки преобладают над "подсеточным" форсингом, всегда расположен в коротковолновой части спектра). Однако, помимо аппроксимационных ошибок дискретные аппроксимации нелинейных слагаемых порождают ошибки наложения, связанные с невозможностью отображения на заданной сетке всего коротковолнового контента, возникающего при нелинейном взаимодействии коротковолновых гармоник (см. классификацию численных ошибок, введенную в Ghosal, 1996 и Kravchenko and Moin, 1997). Повышение порядка аппроксимации, напротив, приводит к увеличению этих ошибок. В любом случае, интегральный вклад в решение ошибок дискретизации значительно превышает вклад подсеточных членов, причем отмечается лидирующая роль ошибок наложения (Ghosal, 1996). Следует заметить, что в отличие от конечно-разностных схем псевдо-спектральный метод позволяет полностью избавиться от ошибок наложения при помощи спектрального усечения (Orszag, 1970).

Таким образом, из работы (Ghosal, 1996) следует, что оставаясь в рамках традиционного представления $\bar{\Delta} = \Delta_g$, невозможно предложить сколь-либо обоснованный подход к построению турбулентных замыканий в конечно-разностных LES-моделях. Выбор $\bar{\Delta} > \Delta_g$, т.е. численное решение системы уравнений (1.6.5) на более мелкой, чем эффективная ширина используемого фильтра, сетке существенно улучшает априорные оценки.

В работе (Lund, 1997) было предложено переформулировать постановку задачи следующим образом:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \widetilde{\bar{u}_i \bar{u}_j}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau'_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_i \partial x_j} + \bar{F}_i^e, \quad (1.6.8)$$

где волной сверху обозначена операция дополнительной фильтрации, а

$$\tau'_{ij} = \overline{u_i u_j} - \widetilde{\bar{u}_i \bar{u}_j} \quad (1.6.9)$$

есть новый тензор турбулентных напряжений. Формулировка (1.6.8, 1.6.9) является одним (но не единственным, см. Lund, 1997, Gulbrand and Chow, 2003, Winckelmans and Jeanmart, 2001, Katorodes et al., 2005) из вариантов того, что принято называть явной фильтрацией. Полагается, что дополнительная фильтрация нелинейных членов позволяет уменьшить ошибки дискретизации. Однако, при выборе в качестве $F_{\bar{\Delta}}$ любого дискретного фильтра (кроме спектрального – с шириной $\tilde{\Delta} = \bar{\Delta}$) возникает ряд новых проблем, среди которых неинвариантность нелинейных членов относительно галилеева преобразования координат и несохранение вторых моментов (дополнительная диссипация). Кроме того, вопрос о

построении нового замыкания, аппроксимирующего тензор τ'_{ij} , остается открытым. Конечно-разностные модели в постановке (1.6.8), по-видимому, не дают однозначного преимущества (см. например, Gulbrand and Chow, 2003, Lund and Kaltenbach, 1995). При этом отмечается (Gulbrand and Chow, 2003) большая чувствительность модели (1.6.8) к выбору турбулентного замыкания τ'_{ij} по сравнению с традиционным подходом (1.6.5) – (1.6.7).

Использование явной фильтрации обусловлено необходимостью описывать явно только относительно крупные вихри на достаточно мелкой сетке. Достичь этого результата можно не только используя прием (1.6.8), но и заранее сконструировав турбулентное замыкание для тензора (1.6.7) с учетом функции пропускания выбранного пространственного фильтра. Необходимо, чтобы турбулентное замыкание описывало не только взаимодействия между движениями в разрешаемом диапазоне волновых чисел и "подсеточными" пульсациями, но и часть взаимодействий в разрешаемом диапазоне, подавленную фильтрацией. В рамках такой интерпретации точнее говорить не о "подсеточном", а о "подсеточном/подфильтровом" турбулентном замыкании. При таком подходе автоматически снимаются упомянутые выше требования к явному фильтру, ограничивающие область его выбора. Если фильтр имеет гладкую в спектральном пространстве функцию пропускания, существенно уменьшающую амплитуду самых коротковолновых гармоник, то величина ошибок аппроксимации нелинейного слагаемого будет снижена.

Теоретический анализ ошибок, проведенный в (Ghosal, 1996), является априорным и не связан с тем или иным турбулентным замыканием, численным моделированием и специфическим выбором моделируемого турбулентного потока. В работе (Kravchenko and Moin, 1997), на примере моделирования турбулентного потока в канале, проведено сравнение центрально-разностных аппроксимаций различного порядка точности. При этом различные схемы имитировались при помощи одного и того же псевдо-спектрального кода путем замены волновых чисел на модифицированные волновые числа, соответствующие дисперсионному соотношению выбранной аппроксимации. Такой подход наряду с универсальностью программного кода для различных схем дает возможность использовать спектральное усечение (Orszag, 1970) в приложении к модели, имитирующей поведение конечно-разностной. Было отмечено, что устранение ошибок наложения в неконсервативных по энергии схемах (даже низкого порядка точности) приводит к существенному улучшению результатов. В то же время, при использовании кососимметричной формы записи нелинейных членов, сохраняющей энергию, различие между результатами расчетов с усечением и без усечения оказались минимальными. В противоположность с выводами априорного анализа (Ghosal, 1996) в (Kravchenko and Moin, 1997) был сделан вывод о лидирующей роли аппроксимационных ошибок в моделях, использующих консервативные по энергии конечно-разностные дискретизации как высокого, так и низкого порядка точности. Необходимо заметить, что в работе (Kravchenko and Moin, 1997) использовалась динамическая модель Смагоринского (Germano et al., 1991, Lilly, 1992).

В работе (Park et al., 2004), помимо статического априорного анализа ошибок дискретизации, приводится динамический анализ эффективности компактных численных схем, в том числе, слабодиссипативных противопотоковых схем высокого порядка точности, в применении к LES моделированию затухающей решеточной турбулентности, сдвиговой турбулентности в канале и турбулентности при обтекании цилиндра. Основываясь на результатах численных тестов, представленных в (Park et al., 2004), также можно сделать заключение о том, что использование консервативных по энергии аппроксимаций совместно с динамическим замыканием (Germano et al., 1991, Lilly, 1992) позволяет существенно уменьшить роль ошибок наложения в динамике вихреразрешающих моделей. При этом "идеальная" подсеточная модель (т.е. модель с предписанными, рассчитанными по результатам прямого моделирования, значениями

турбулентных напряжений) значительно уступает динамическому подходу. В работе (Jiménez, 1995) показано, что преимущество замыканий динамического типа в сочетании с диссипативными моделями подсеточной турбулентности достигается за счет автоматической подстройки величины модельной диссипации под величину генерации турбулентной энергии на уровне тестовой фильтрации (или, что есть то же самое, каскад турбулентной энергии по спектру через заданный "пробный" масштаб). При этом диссипативное слагаемое в динамической модели регулирует сток энергии в "подсеточную" область не за счет перестройки структуры и изменения энергии самых коротковолновых составляющих потока, а за счет автоматического выбора коэффициентов, ответственных за величину диссипации. Поскольку ошибки наложения возникают как результат взаимодействия двух гармоник с волновыми числами $|k_1| \leq |k_g|$, $|k_2| \leq |k_g|$, $|k_1 + k_2| > |k_g|$, где k_g - максимальное волновое число, определяемое шагом сетки, то энергия этих ошибок также является проявлением прямого каскада в коротковолновую область и может быть эффективно оценена и подавлена динамическим замыканием.

Даже простейшие диссипативные турбулентные замыкания (например, стандартная модель Смагоринского, Smagorinsky, 1963) могут регулировать сток энергии за счет перестройки коротковолнового участка спектра (см. Jiménez, 1995). Неверная работа модели возможна тогда, когда сток энергии регулируется за счет изменения энергии и структуры пульсаций скорости в диапазоне волновых чисел, пересекающемся со спектральным интервалом на котором происходит ее генерация. Поэтому, применение многих турбулентных замыканий ограничено необходимостью четкого разделения масштабов, на которых происходит генерация энергии, и масштабов, на которых энергия удаляется из системы "подсеточной" моделью. Последнее требование не всегда достижимо, например, при моделировании сдвиговой турбулентности в областях, ограниченных твердыми границами. Здесь пространственный масштаб, на котором происходит накачка энергии, определяется расстоянием от стенки, т.е. может быть сравним с минимальным размером вихрей, воспроизводимых моделью. Как следствие, многие диссипативные замыкания, использующие наперед заданные константы, которые определены, как правило, для инерционного интервала спектра, приводят к излишней диссипации турбулентной энергии у поверхности, уменьшению турбулентного переноса импульса и сильно завышенным градиентам средней скорости (см. Andren et al., 1994).

Для того, чтобы избежать этого недостатка при моделировании пограничных слоев над плоской поверхностью, часто используют полуэмпирический подход: масштаб подсеточных вихрей искусственно уменьшается при приближении к поверхности и тем самым уменьшается эффективная турбулентная вязкость (Mason and Thomson, 1992). Кроме того, при моделировании атмосферного пограничного слоя, часто используются гибридные модели (Sullivan et al., 1994), в которых обмен импульсом и энергией в приземном слое корректируется с учетом универсальных функций теории подобия. Такой подход, как правило, позволяет добиться точного поведения средних значений скорости (а также моделируемых скалярных величин в случае стратифицированного пограничного слоя), однако не гарантирует верного воспроизведения изменчивости. Динамические модели обладают свойством автоматически снижать турбулентную вязкость у поверхности и позволяют избежать упомянутых проблем без привлечения дополнительных «подгоночных» процедур.

Простейшие замыкания для LES-моделей. Наиболее широкое распространение получили модели, основанные на введении (по аналогии с молекулярной вязкостью) эффективной турбулентной вязкости. В таких моделях девиатор тензора напряжений

$$\tau_{ij}^o = \tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} \text{ вычисляется по формуле:}$$

$$\tau_{ij}^o = -2K_T \bar{S}_{ij}, \quad \bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.6.10)$$

Здесь $\bar{S}_{ij}$ – тензор скорости деформаций, построенный по фильтрованному полю скорости $\bar{u}_i$; $K_T = K_T(\bar{\vec{u}}, \bar{\vec{x}}, t) \geq 0$ – зависящий от решения коэффициент турбулентной вязкости. Принимается, что при решении системы (1.6.5) след тензора напряжений включен в новое модифицированное давление $\bar{p}^* = \bar{p} + \frac{1}{3} \tau_{kk}$. Такие модели способны параметризовать прямой энергетический каскад от крупных вихрей к мелкомасштабной, не разрешенной явно, турбулентности, но их общим недостатком является низкая корреляция рассчитанных компонент тензора напряжений с наблюдаемыми значениями (см., например, Bardina et al., 1980). Выбор зависимости $K_T(\bar{\vec{u}}, \bar{\vec{x}}, t)$ чрезвычайно разнообразен и для более широкого ознакомления с математическим и физическим обоснованием той или иной зависимости можно обратиться к работе (Berselli et al., 2006).

Одной из простейших и наиболее часто используемых моделей такого типа является замыкание Смагоринского (Smagorinsky, 1963), предполагающее локальный баланс сдвиговой генерации подсеточной турбулентной кинетической энергии и скорости ее диссипации. Полагается, что анизотропную часть тензора напряжений τ_{ij} (девиатор тензора напряжений) можно представить в следующем виде:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} \approx \tau_{ij}^s = -2C \Delta_g^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}, \quad (1.6.11)$$

где $\Delta_g = \bar{\Delta}$ – шаг сетки модели (в тех случаях, когда шаги сетки по различным направлениям не равны между собой, обычно выбирается средне-геометрическое значение $\Delta_g = \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z}$); $|\bar{S}| = \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}$ – норма тензора скорости деформаций; $C = C_s^2$ – константа, более известная как квадрат коэффициента Смагоринского C_s . Масштаб длины $X_s = C_s \Delta_g$ можно трактовать как длину смещения для вихрей подсеточного масштаба.

Классическое замыкание Смагоринского обладает рядом достоинств, оправдывающих ее применение в вихреразрешающих моделях. Оно сохраняет в дифференциальной постановке присущие исходным уравнениям Навье-Стокса симметрии по отношению к обобщенному галилееву преобразованию координат, группам вращений и отражений, а также твердотельному вращению с переменной угловой скоростью (см. табл. 1 из работы Razafindralandy and Hamdouni, 2006). Замыкание диссипативно, причем диссипация пропорциональна кубу модуля тензора деформаций $\varepsilon \sim |\bar{S}|^3$ (Berselli et al., 2006), что обеспечивает ее большее смещение в коротковолновую область, чем диффузия с постоянной вязкостью, для которой $\varepsilon \sim |\bar{S}|^2$. Получено доказательство существования и единственности решения регуляризованной с помощью добавочного слагаемого в виде (1.6.11) системы уравнений трехмерной динамики несжимаемой жидкости (Ладыженская, 1970). Найдена (Lilly, 1967) теоретическая оценка параметра Смагоринского $C_s \approx 0.17$, основанная на предположении равенства модельной диссипации и вязкой диссипации в изотропной однородной турбулентности. На основе априорного анализа данных DNS показано (Bardina et al., 1980, Clark et al., 1979), что модель (1.6.11) хорошо аппроксимирует сток энергии в область подсеточных масштабов (корреляция модельной и реальной диссипации оказывается на уровне $\approx 0.5 - 0.7$).

К недостаткам классической модели Смагоринского с постоянным коэффициентом следует отнести завышенную диссипацию в областях с ламинарным потоком и областях, в которых турбулентность анизотропна, а также низкую (≈ 0.2) корреляцию между наблюдаемым и параметризуемым тензором напряжений, присущую всем моделям, основанным на введении эффективной турбулентной вязкости, вследствие несовпадения ориентации тензора турбулентных напряжений и тензора деформаций.

Последнее особенно существенно при моделировании пристеночных турбулентных потоков, турбулентных струй и других течений с большими градиентами средней скорости. В таких случаях не только диссипация, но и значительная часть среднего потока импульса должна быть описана подсеточной моделью. Диффузионная модель использует один и тот же эффективный коэффициент для описания и диссипации и подсеточного потока импульса. Варьируя этот коэффициент, зачастую оказывается невозможным одновременно удерживать изменчивость явно разрешаемых пульсаций на нужном уровне и восполнить вклад подсеточных составляющих в обмен импульсом. Например, известно (Bardina et al., 1980), что модель (1.6.11) сильно занижает абсолютную величину компонент турбулентных напряжений. Таким образом, в модели (1.6.11) для того, чтобы поддержать подсеточный поток импульса в направлении среднего градиента на наблюдаемом уровне, нужно увеличить коэффициент Смагоринского, что неизбежно вызовет чрезмерное подавление пульсаций, воспроизводимых явно.

В работе (Bardina et al., 1980) было предложено замыкание, основанное на подобии тензора напряжений τ_{ij} , рассчитанного по реальным флуктуациям поля скорости в турбулентном потоке, тензору напряжений, построенному по фильтрованному полю скорости:

$$\tau_{ij} \approx \tau_{ij}^B = \overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \bar{\tilde{u}}_i \bar{\tilde{u}}_j. \quad (1.6.12)$$

В априорных тестах это замыкание достаточно хорошо воспроизводит корреляцию между моделируемым и наблюдаемым тензором турбулентных напряжений ($\approx 0.7 - 0.8$), однако сильно занижает диссипацию, что может приводить к численной неустойчивости при включении (1.6.12) в LES-модели, использующие бездиссипативные аппроксимации адвективных слагаемых.

В работе (Liu et al., 1999) показано, что существенная часть высокой корреляции в модели (1.6.12) объясняется именно неидеальностью пространственных фильтров и использованием общей информации при расчете реального и модельного тензоров турбулентных напряжений. При использовании в априорном анализе дискретной выборки из DNS-данных корреляция снижается, однако остается значимой и большей, чем для случайного сигнала с тем же энергетическим спектром. Это говорит о способности замыкания частично параметризовать взаимодействия с мелкомасштабной турбулентностью (лежащей за пределами спектрального интервала, определяемого сеточным разрешением). Известно, что хотя (1.6.12) интегрально диссипативна, она может обеспечивать локальную генерацию энергии.

В работе (Zang et al., 1993) реализовано смешанное замыкание, включающее в себя диссипативную "подсеточную" составляющую Смагоринского (1.6.11) с динамической оценкой коэффициента C_s и аппроксимацию "подфильтровых" (неразрешаемых явно в полной мере) взаимодействий с помощью модели (1.6.12):

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}^S + \tau_{ij}^B = -2(C_s \bar{\Delta})^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} + (\overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \bar{\tilde{u}}_i \bar{\tilde{u}}_j). \quad (1.6.13)$$

Помимо первых двух симметричных свойств, отмеченных выше для стандартной модели Смагоринского (Razafindralandy and Hamdouni, 2006), динамическая модель (1.6.13) является инвариантом относительно преобразования масштабирования. Относительно

твердотельного вращения это замыкание инвариантно только при специальных ограничениях на оператор фильтрации. Однако почти все упомянутые симметрии могут быть нарушены при дискретизации системы (1.6.5).

Динамический подход. Идея замыканий динамического типа (Germano et al., 1991) состоит в последовательном использовании двух фильтров с различной шириной пропускания. Применение более широкого вторичного фильтра ($\widehat{a}$) к (1.6.7) приводит к следующей формулировке:

$$\widehat{\tau}_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j}. \quad (1.6.14)$$

С другой стороны, можно получить вид тензора напряжений T_{ij} для движений, остающихся после последовательного применения двух фильтров ($\bar{a}$ и $\widehat{a}$) к исходной системе уравнений (1.6.1):

$$T_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j}. \quad (1.6.15)$$

Вычитание (1.6.14) из (1.6.15) приводит к тождеству

$$T_{ij} - \widehat{\tau}_{ij} = \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j}, \quad (1.6.16)$$

в котором отсутствуют нефильтрованные переменные. Предполагая, что одна и та же подсеточная модель, например (1.6.13), пригодна для приближенного вычисления τ_{ij} и T_{ij} , а также подставляя результирующие выражения в тождество (1.6.16), можно получить следующее соотношение:

$$(C_{\bar{\Delta}} \bar{\Delta})^2 M_{ij}^{\tau} - (C_{\widehat{\Delta}} \widehat{\Delta})^2 M_{ij}^T = L_{ij} - H_{ij} + \varepsilon_{ij}, \quad (1.6.17)$$

где $C_{\bar{\Delta}} = C_s(\bar{x}, \bar{u}, \bar{\Delta})$ и $C_{\widehat{\Delta}} = C_s(\bar{x}, \bar{u}, \widehat{\Delta})$ – зависящие от пространственных координат и решения $\bar{u}(\bar{x}, t)$ коэффициенты Смагоринского для моделей, использующих базовый и вторичный фильтры; ε_{ij} – неравная нулю (вследствие невозможности точного описания тензора турбулентных напряжений) ошибка тождества Германо; тензоры L_{ij} , H_{ij} , M_{ij}^{τ} и M_{ij}^T задаются следующими выражениями:

$$L_{ij} = \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j}, \quad H_{ij} = \left(\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} \right) - \left(\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} \right), \quad (1.6.18)$$

$$M_{ij}^{\tau} = 2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}, \quad M_{ij}^T = 2 |\widehat{S}| \widehat{S}_{ij}. \quad (1.6.19)$$

Для динамической модели Смагоринского (1.6.11) $H_{ij} = 0$.

Далее, можно считать, что коэффициент C_s не зависит от эффективной ширины фильтра, т.е.:

$$C_s(\bar{x}, \bar{u}, \widehat{\Delta}) = C_s(\bar{x}, \bar{u}, \bar{\Delta}) = C_s(\bar{x}, \bar{u}). \quad (1.6.20)$$

Помимо этого, предполагается, что отношение эффективной ширины вторичного фильтра к эффективной ширине базового фильтра $\alpha(\bar{x})$ известно и не зависит от свойств решения. Это свойство может нарушиться после дискретизации системы уравнений (1.6.5),

поскольку конечно-разностное дифференцирование представляет собой дополнительный, зависящий от свойств самого решения, неизвестный оператор $F_{\Delta}(\bar{u})$. Известно (Lund, 1997, Rogallo and Moin, 1984), что этот оператор приводит к дополнительной одномерной фильтрации нелинейных членов (1.6.5). Таким образом, для того, чтобы зафиксировать $\alpha(\bar{x})$ в дискретной модели, необходимо предположить, что

$$\frac{\widehat{\Delta}(\bar{u}, \bar{x})}{\overline{\Delta}(\bar{u}, \bar{x})} = \frac{\widehat{\Delta}(\bar{v}, \bar{x})}{\overline{\Delta}(\bar{v}, \bar{x})} = \alpha(\bar{x}) \quad (1.6.21)$$

для любых решений $\bar{u}$ и $\bar{v}$. Если выполняются предположения (1.6.20) и (1.6.21), то можно получить переопределенную систему линейных уравнений для параметра $X(\bar{x}) = [C_s(\bar{x})\bar{\Delta}]^2$, определяющего скорость диссипации турбулентной энергии:

$$\widehat{(XM_{ij}^{\varepsilon})}^d - \alpha^2 X(M_{ij}^T)^d = L_{ij}^d - H_{ij}^d + \varepsilon_{ij}^d. \quad (1.6.22)$$

Индекс d в этом выражении означает девиатор соответствующего тензора. Искомое решение для параметра X находят, минимизируя квадрат невязки $\varepsilon^2 = \varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}$ (Lilly, 1992). Различные способы решения системы (1.6.22) можно найти в работе (Ghosal et al., 1995). В работе Германо (Germano et al., 1991) предлагался другой способ сведения переопределенной системы уравнений к системе, имеющей единственное решение: $\varepsilon_{ij}\bar{S}_{ij} = 0$. Этот способ приводит к близким результатам, но более подходит для чисто диссипативных замыканий, как, например, динамическая модель Смагоринского.

Необходимо заметить, что левая часть выражения (1.6.17) содержит только тензоры со следом равным нулю, и в дифференциальной формулировке минимизация ε^2 относительно искомой переменной X будет приводить к результату, не зависящему от следа правой части выражения. Однако, при дискретизации системы уравнений (вследствие неточного коммутирования дискретного оператора вторичной фильтрации с дискретным оператором дифференцирования по пространству и неточного выполнения дискретного аналога уравнения неразрывности для дважды фильтрованного поля скорости) оказывается предпочтительным использовать только анизотропную часть соответствующих тензоров. Ниже для простоты записи, индекс d опущен и девиаторы тензоров обозначены так же, как сами тензоры.

Следует заметить, что в выражении (1.6.22) искомый параметр X может зависеть от пространственных координат. Обычно, этой зависимостью пренебрегают, полагая, что

$$\widehat{XM_{ij}^{\varepsilon}} = X\widehat{M_{ij}^{\varepsilon}}. \quad (1.6.23)$$

Данный прием строго обоснован математически в том случае, если на этапе построения модели вводится следующее ограничение на параметр X :

$$X(x_m, x_l, x_k) = \langle X \rangle_{x_m, x_l}(x_k). \quad (1.6.24)$$

Здесь угловые скобки обозначают осреднение по координатам x_m и x_l . При этом вторичная фильтрация должна производиться только вдоль тех пространственных направлений (x_m, x_l) , вдоль которых X не изменяется. Иными словами, такой подход применим только при наличии статистически однородных пространственных направлений и в сочетании с двумерными (или одномерными) фильтрами. Как правило, полагается также, что

$$\alpha(\bar{x}) = \text{const}. \quad (1.6.25)$$

Достичь последнего удастся не всегда в силу наличия твердой границы и невозможности применения симметричных трехмерных фильтров вблизи нее.

В работе (Глазунов, 2009а) предложена дискретная формулировка задачи, согласно которой выражение (1.6.17) представлено в следующем виде:

$$AX = R + \varepsilon, \quad (1.6.26)$$

где $X(\vec{x}_g) = (C_s \bar{\Delta})^2$ – искомое решение (вектор размерности $N = N_x \times N_y \times N_z$); $R = L - H$ – правая часть (вектор размерности $5N$, где число 5 означает количество независимых компонент тензоров, поскольку все тензоры симметричны и их след равен нулю); A – неплотная прямоугольная матрица размерности $5N \times N$; ε – невязка предопределенной системы линейных алгебраических уравнений.

Если представить дискретную аппроксимацию оператора вторичной фильтрации F_{Δ} в виде произведения одномерных фильтров вдоль каждого из пространственных направлений $F_{\Delta}^g = F_z F_y F_x$, то:

$$\begin{aligned} A &= F_z F_y F_x M^{\tau} - \alpha^2 M^T, \\ A^* &= M^{\tau} F_x^* F_y^* F_z^* - \alpha^2 M^T. \end{aligned} \quad (1.6.27)$$

Здесь M^T и M^{τ} – диагональные матрицы, составленные из значений соответствующих тензоров; A^* , F_x^* , F_y^* и F_z^* – сопряженные операторы, задающиеся соответствующими транспонированными матрицами. Тогда, применяя метод наименьших квадратов для минимизации $(\varepsilon, \varepsilon)$, можно найти обобщенное решение задачи (1.6.26):

$$A^* AX = A^* R. \quad (1.6.28)$$

Эта система линейных уравнений содержит N уравнений и N неизвестных и может быть решена прямым либо итерационным методом. В динамических замыканиях, использующих предположение (1.6.23), матрица A имеет диагональный вид:

$$A = \widehat{M^{\tau}} - \alpha^2 M^T.$$

Для решения (1.6.28) можно использовать итерационный метод сопряженных градиентов, который не требует никаких других операций, кроме умножения вектора на оператор задачи и вычисления скалярных произведений. И та, и другая операция позволяют эффективно применять параллельные вычисления на компьютерах с распределенной памятью. Оператор задачи плохо обусловлен, поскольку абсолютная величина M_{ij} сильно уменьшается по мере удаления от поверхности и по мере уменьшения среднего градиента скорости. Для того чтобы снизить количество итераций при решении (1.6.28), можно воспользоваться предобуславливанием, например, нормировкой каждого из уравнений системы на величину $\langle M_{ij} M_{ij} \rangle_{xy}$ (здесь x и y – продольная и поперечная координаты). В случае произвольной конфигурации расчетной области можно воспользоваться осреднением по времени.

Отрицательные значения X необходимо принудительно удалять ($X = \max(X, 0)$) после достижения сходимости в итерационной процедуре. Следует отметить, что такой подход может приводить к большим погрешностям в тех случаях, когда количество точек с отрицательными значениями X велико, а абсолютная величина отрицательных значений X не мала. Вообще говоря, требуется условная минимизация функционала $(\varepsilon, \varepsilon)|_{X>0}$. Однако, такая минимизация исключает возможность использования наиболее быстрых итерационных методов.

Дискретные фильтры. Описанная процедура реализована с привлечением трехточечных аппроксимаций "top-hat" фильтра, которые в одномерном случае выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}\bar{a}_i &= \frac{1}{8}a_{i-1} + \frac{3}{4}a_i + \frac{1}{8}a_{i+1}, \\ \hat{a}_i &= \frac{1}{4}a_{i-1} + \frac{1}{2}a_i + \frac{1}{4}a_{i+1},\end{aligned}\tag{1.6.29}$$

где a – подлежащая фильтрации величина, а индекс i – номер узла сетки. Для фильтрации трехмерных полей каждый из фильтров применяется последовательно по всем трем координатам. Произведением базового и вторичного фильтров является следующий фильтр:

$$\hat{\hat{a}}_i = \frac{1}{32}a_{i-2} + \frac{1}{4}a_{i-1} + \frac{7}{16}a_i + \frac{1}{4}a_{i+1} + \frac{1}{32}a_{i+2}.\tag{1.6.30}$$

Преобразования Фурье от весовых функций обоих фильтров представляют собой медленно убывающие с ростом волнового числа функции:

$$\begin{aligned}\hat{G}_{\bar{\Delta}}(k) &= \frac{3}{4} + \frac{1}{4}\cos k\Delta_g, \\ \hat{G}_{\hat{\Delta}}(k) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos k\Delta_g, \\ \hat{\hat{G}}_{\hat{\hat{\Delta}}}(k) &= \hat{G}_{\bar{\Delta}}(k)\hat{G}_{\hat{\Delta}}(k) = \frac{3}{8} + \frac{1}{2}\cos k\Delta_g + \frac{1}{8}\cos^2 k\Delta_g.\end{aligned}$$

Таким образом, эти фильтры достаточно сильно подавляют не только высокочастотные гармоники, но и существенно снижают энергию флуктуаций скорости во всем спектральном диапазоне, воспроизводимом моделью (в том числе и базовый модельный фильтр).

Для определения эффективной ширины дискретного одномерного фильтра с неравными нулю вторыми моментами можно воспользоваться формулой, предложенной в работе (Lund, 1997):

$$\frac{\Delta_f}{\Delta_g} = \sqrt{12 \sum_{j=-(N_f-1)/2}^{j=(N_f-1)/2} j^2 W_f},\tag{1.6.31}$$

где N_f – количество неравных нулю коэффициентов фильтра, W_f – значение j -го коэффициента. Тогда для указанного выше набора фильтров

$$\alpha^2 = \left(\frac{\hat{\hat{\Delta}}}{\bar{\Delta}} \right)^2 = \left(\frac{\hat{\hat{\Delta}}/\Delta_g}{\bar{\Delta}/\Delta_g} \right)^2 = 3.\tag{1.6.32}$$

Оказалось, однако, что выбор $\alpha^2 = 3$ приводит к излишнему подавлению изменчивости (Глазунов, 2009а). Принимая во внимание то обстоятельство, что в случае наличия ошибок дискретизации отношение ширины вторичного и базового фильтров может оказаться неизвестным, величину α^2 следует рассматривать как настроечный параметр. Выбор фильтров и определение их эффективной ширины являются задачами, от решения которых существенно зависят результаты моделирования.

ГЛАВА 2

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ПОДСЕТОЧНЫХ МАСШТАБОВ

Теория трехмерной турбулентности (Колмогоров, 1941), справедливость которой на горизонтальных масштабах менее 1 км хорошо подтверждается данными наблюдений (а также результатами прямого и вихреразрешающего численного моделирования), предсказывает, что вследствие прямого (в сторону меньших масштабов) каскада кинетической энергии в ее спектре формируется широкий инерционный интервал. Здесь спектр приобретает в логарифмических координатах вид прямой с угловым коэффициентом $-5/3$ (закон «пяти третей»). Однако эта теория неприменима для стратифицированных мезомасштабных движений, двумерная или трехмерная природа которых зависит от соотношения характерных вертикальных и горизонтальных масштабов. Для двумерной среды характерен обратный каскад энергии и прямой каскад энтропии (квадрата завихренности), вследствие чего спектр приобретает ту же форму, но с коэффициентом -3 (Мирабель и Монин, 1979).

В земной атмосфере однородная и изотропная турбулентность развивается в атмосферном пограничном слое и охватывает вихри размером в несколько сотен метров и менее (микромасштаб по спектральному признаку). Динамика двумерной жидкости характерна для тех процессов, вертикальный размер которых значительно меньше горизонтального, т. е. для планетарных и синоптических процессов, а также для процессов масштаба мезо- α (макромасштаб по спектральному признаку). По данным самолетных измерений, проведенных в средних и высоких широтах Северного полушария на высотах от 9 до 14 км (Nastrom and Gage, 1985), наклон спектральных распределений оказался близким к $-5/3$ (а не -3 или больше, как следует из теории двумерной турбулентности) в мезомасштабной части спектра (≈ 10 -500 км). Для этого интервала масштабов общепринятой теории, объясняющей форму спектра, на настоящий момент не существует. Эксперименты с прогностической региональной моделью WRF (Skamarock, 2004) показали, что рассчитанные спектры хорошо совпадают в мезомасштабном диапазоне с наблюдаемыми, включая переход от показателя « $-5/3$ » к степени « -3 ». Однако модельный спектр в коротковолновой его части оказался сильно зависящим от свойств вычислительной технологии (в частности, от уровня дополнительной диссипации, обусловленной использованием конечно-разностной схемы).

2.1. Пограничный слой атмосферы

Каскад энергии в сторону длинных волн определяется процессами ее диссипации в турбулентном пограничном слое атмосферы, что обуславливает особые требования к правильному его описанию в крупномасштабных (в частности, климатических) моделях (Дымников и Филатов, 1994, Dymnikov and Filatov, 1996). Пограничный слой, располагающийся вблизи поверхности Земли и имеющий характерный вертикальный размер ~ 1 км, является ключевым звеном климатической системы. В этом слое обеспечивается: (1) преобразование энергии солнечной радиации, поглощенной подстилающей поверхностью, в энергию крупномасштабных движений в атмосфере и океане (с помощью турбулентного переноса), (2) тепловлагоперенос в системе "растительность - снег - почва" и (3) контроль уровня диссипации кинетической энергии всей климатической системы. Важно также и то, что пограничный слой – это среда обитания человека, не только непосредственно воздействующая на его жизнедеятельность, но и сама зависящая от результатов этой деятельности. Условно пограничный слой можно разбить на две области: непосредственно примыкающий к

подстилающей поверхности слой, именуемый слоем постоянных потоков, и расположенный над ним переходный к свободной атмосфере слой.

Во многих приложениях часто требуется лишь знание о важнейших интегральных параметрах турбулентных течений, таких, например, как профиль скорости, расход жидкости (или газа) и закон сопротивления. В то же время, богатый экспериментальный материал, накопленный при лабораторном изучении течений в круглых трубах и в пограничном слое на плоской пластинке, позволяет не только получить эту информацию, но и является эталоном для проверки различных теорий и гипотез о природе турбулентности. Уравнения Навье-Стокса являются подходящим математическим аппаратом для моделирования турбулентных течений (см. раздел 1.6). Проблема, однако, состоит в том, что невозможно предсказать в деталях движение каждого вихря, но можно попытаться описать эволюцию осредненного течения и некоторых других статистических характеристик. Впервые такого рода общие соображения, относящиеся к произвольным турбулентным течениям и лежащие в основе всей теории турбулентности, были высказаны Рейнольдсом (1894). Вместе с тем, обычное («житейское») определение турбулентных течений как течений, сопровождающихся беспорядочными пульсациями всех гидродинамических величин, недостаточно для построения математической теории турбулентности. С позиций такой теории, турбулентными являются лишь такие течения, для которых существует статистический ансамбль аналогичных течений с некоторым определенным распределением вероятности для значений всевозможных гидродинамических полей. На практике (измерений и модельных расчетов) обычно используются не средние по ансамблю, а временные или пространственные средние, так что следует требовать еще, чтобы случайные поля гидродинамических величин удовлетворяли условиям эргодической теоремы.

Уравнения Рейнольдса. Самыми простыми статистическими характеристиками случайных гидродинамических полей являются их средние значения. Разности $u' = u - \bar{u}$ между индивидуальными значениями поля скорости u и его средним значением $\bar{u}$ представляют собой пульсации этого поля. Возможность разложения гидродинамических полей на их средние значения и пульсации является основным постулатом теории Рейнольдса. Средние значения гидродинамических полей обычно оказываются весьма гладкими и медленно меняющимися. Пульсации же, наоборот, характеризуются большой изменчивостью во времени и в пространстве. Минимальные масштабы и периоды турбулентных пульсаций на несколько порядков превосходят масштабы и периоды молекулярных движений (Монин и Яглом, 1967). Так например, размеры наименьших неоднородностей, наблюдающихся в воздушных и водных турбулентных потоках, имеют порядок нескольких миллиметров или, в крайнем случае, десятых долей миллиметра, в то время как в нормальных условиях длина свободного пробега молекул воздуха имеет порядок 10^{-4} мм, а молекул воды — намного меньший порядок. Более того, скорости гидродинамических потоков по порядку величины не превосходят средней скорости теплового движения молекул (близкой к 500 м/с) и потому характерные периоды турбулентных пульсаций на несколько порядков превосходят среднее время между молекулярными столкновениями. Это означает, что на пространственно-временных масштабах, сравнимых с размерами минимальных неоднородностей и минимальными периодами пульсаций, турбулентные течения могут быть описаны с помощью дифференциальных уравнений гидродинамики.

Поскольку индивидуальные реализации гидродинамических полей турбулентного потока удовлетворяют определенным дифференциальным уравнениям, то их статистические характеристики оказываются связанными рядом важных соотношений. Простейшие связи такого рода были установлены Рейнольдсом с помощью непосредственного осреднения уравнений Навье-Стокса гидродинамики несжимаемой жидкости постоянной плотности:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho \nu \Delta u_i + \rho F_i^e. \quad (2.1.1)$$

Применяя ко всем слагаемым этих уравнений операцию осреднения и используя свойство ее коммутативности с дифференцированием по координатам и по времени, а также используя равенство

$$\overline{u_i u_j} = \overline{(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{u}_j + u'_j)} = \bar{u}_i \bar{u}_j + \overline{u'_i u'_j} \quad (2.1.2)$$

можно получить соотношения

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_i \bar{u}_j + \rho \overline{u'_i u'_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho \nu \Delta \bar{u}_i + \rho \bar{F}_i^e, \quad (2.1.3)$$

обычно называемые уравнениями Рейнольдса. В отличие от (1.6.7) в (2.1.2) предполагается, что $\overline{\bar{u}} = \bar{u}$. Уравнения (2.1.3) содержат новые неизвестные величины $\tau_{ij}^* = -\rho \overline{u'_i u'_j}$, описывающие эффект пульсационных компонент скорости. Осредненное уравнение неразрывности записывается в прежней форме:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1.4)$$

и аналогичный вид имеет уравнение неразрывности для пульсаций:

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0.$$

Из выражения для среднего значения плотности потока импульса

$$\overline{\rho u_i u_j + p \delta_{ij} + \sigma_{ij}} = \rho \bar{u}_i \bar{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} + \rho (\bar{\sigma}_{ij} + \overline{u'_i u'_j}),$$

где $\sigma_{ij} = -\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = -2\nu S_{ij}$ представляет собой тензор вязких напряжений в несжимаемой жидкости, S_{ij} есть тензор скорости деформации, а δ_{ij} - символ Кронекера, следует, что по отношению к осредненному движению роль тензора напряжений играет тензор $\tau_{ij} = -\rho \bar{\sigma}_{ij} - \rho \overline{u'_i u'_j} = -\rho \bar{\sigma}_{ij} + \tau_{ij}^*$. Таким образом, в турбулентном течении происходит как обмен импульсом между жидкими частицами за счет сил молекулярной вязкости, описываемый тензором вязких напряжений, так и передача импульса от одних объемов жидкости к другим, вызываемая перемешиванием, создаваемым пульсациями скорости. Иными словами, влияние турбулентного перемешивания на осредненное движение оказывается аналогичным влиянию вязкости и чтобы подчеркнуть это, уравнения Рейнольдса иногда записываются также в виде

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \overline{u'_i u'_j} \right) + \bar{F}_i^e. \quad (2.1.5)$$

Величины $-\overline{\rho u'_i u'_j}$ в уравнениях для осредненного движения имеют смысл компонент тензора дополнительных напряжений, возникающих из-за турбулентных пульсаций подобно тому, как в обычной гидродинамике микроскопические молекулярные движения приводят к появлению вязких напряжений. Эти дополнительные напряжения называются в теории турбулентности напряжениями Рейнольдса.

Применяя процедуру осреднения к уравнениям гидротермодинамики атмосферы и океана, записанных в форме приближения Буссинеска (1.1.30), можно получить следующий их аналог для осредненного течения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{\bar{u}}}{\partial t} + (\vec{\bar{u}} \cdot \nabla) \vec{\bar{u}} &= -\nabla \bar{\pi} + \bar{b} \vec{n} - \bar{f} \vec{n} \times \vec{\bar{u}} + \nu \nabla^2 \vec{\bar{u}} - \overline{(\vec{u}' \cdot \nabla) \vec{u}'}, \\ \frac{\partial \bar{b}}{\partial t} + (\vec{\bar{u}} \cdot \nabla) \bar{b} &= \nabla \cdot (\chi \nabla \bar{b} - \overline{\vec{u}' b'}) + Q_b. \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

При этом вектор $\vec{\bar{b}u'}$ описывает адвективный перенос плавучести осредненным движением, $\chi \nabla \bar{b}$ - перенос за счет молекулярной диффузии, а величина

$$q_i = -\overline{\rho u'_i b'} \quad (2.1.7)$$

представляет собой плотность турбулентного потока плавучести по направлению отрицательной оси x_i .

Осреднение по Рейнольдсу в крупно- и мезомасштабных моделях. Свойства осреднения, которые используются при выводе уравнений Рейнольдса, строго выполняются только, если под этой операцией понимается (Монин и Яглом, 1965) математическое ожидание случайной величины в данной точке пространства и в данный момент времени (часто используется термин «осреднение по ансамблю»). Однако в практических расчетах используется осреднение по некоторой области пространства, под которой обычно понимается ячейка конечно-разностной сетки. В этом случае, вообще говоря:

$$\overline{\phi f} \neq \bar{\phi} \bar{f} \quad (2.1.8)$$

и, следовательно, $\bar{\bar{f}} \neq \bar{f}$ и $\bar{f}' \neq 0$, что приводит к изменению вида осредненных уравнений. Смысл соотношения (2.1.8) можно пояснить примером, в котором осреднение производится по фиксированной области пространства (параллелепипед с ребрами $\Delta x, \Delta y, \Delta z$) для трехмерного случая задается формулой:

$$\bar{f}(x_0, y_0, z_0) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{x_0 - \Delta x/2}^{x_0 + \Delta x/2} \int_{y_0 - \Delta y/2}^{y_0 + \Delta y/2} \int_{z_0 - \Delta z/2}^{z_0 + \Delta z/2} f(x, y, z) dx dy dz. \quad (2.1.9)$$

Очевидно, что при таком определении (2.1.8) будет выполняться достаточно точно, если в пределах области осреднения само среднее значение $\bar{f}$ меняется слабо. Критерий «слабости» можно получить, например, разлагая функцию f в ряд Тейлора в области

осреднения (Курбацкий, 1988). В качестве иллюстрации применимости свойства (2.1.8) (более точно, его следствия $\overline{\overline{\phi}} = \overline{\phi}$) можно привести два случая одномерного осреднения, в одном из которых $\overline{\phi'} \approx 0$, а в другом $\overline{\phi'} \neq 0$ (рис. 2.1.1).

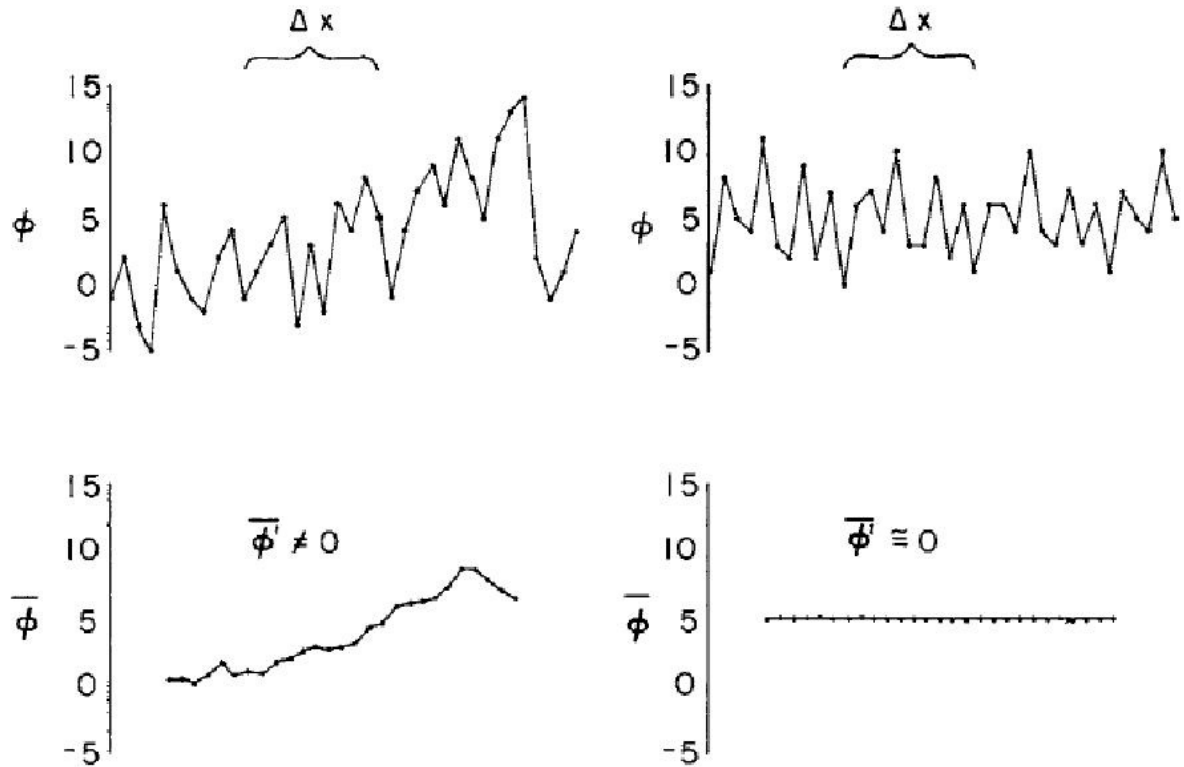


Рис. 2.1.1. Примеры одномерного осреднения поля ϕ (Pielke, 2002). Осреднение производилось по 10-точечному интервалу (показан сверху). При пространственном распределении ϕ , показанном слева, среднее значение меняется вдоль оси x существенно, поэтому $\overline{\phi'} \neq 0$. Справа, напротив, среднее значение близко к постоянной, поэтому $\overline{\phi'} \approx 0$.

Поскольку от вида осреднения зависит форма уравнений Рейнольдса («фильтрованных» уравнений Навье-Стокса), важно знать, при каких условиях пространственное осреднение достаточно точно приближает осреднение по ансамблю. При этом предполагается, что пространственное распределение гидродинамической величины в каждый момент времени является одной реализацией случайного поля. Пусть имеется одномерное (для простоты) случайное поле скорости. Известно (Меллор, 1988, Бендат и Пирсол, 1974), что безразмерная среднеквадратичная ошибка средней скорости равна $(2\Lambda / L_x)^{1/2} \sigma_u^2 / U$, где $\sigma_u^2 = \overline{(u - U)^2}$ – дисперсия скорости, $\Lambda = \int_0^\infty F_u(r) dr$ – интегральный макромасштаб турбулентности (мера расстояния, на котором двухточечные корреляции случайного поля еще значительны), $F_u(r)$ – корреляционная функция для скорости, L_x – интервал осреднения по направлению средней скорости U . Тогда, требуя, чтобы эта ошибка составляла менее 0.1, можно получить условие на интервал осреднения

$$L_x > 2 \cdot 10^2 \frac{\sigma_u^4 \Lambda}{U^2}. \quad (2.1.10)$$

Подстановка в (2.1.10) характерных для тропосферы значений $U = 10$ м/с, $\sigma_u^2 = 1$ м/с, а также использование оценки (Schabauer and Klebanoff, 1951) $\Lambda = 0.5h$, где $h \sim 1000$ м - толщина пограничного слоя атмосферы, приводит к величине $L_x > 1000$ м. Это условие выполняется в глобальных и мезомасштабных моделях, но нарушается в вихреразрешающих моделях. Таким образом, турбулентное замыкание уравнений Рейнольдса для первых двух классов моделей необходимо сформулировать для слагаемых вида $\overline{u_i' \phi'}$ (ϕ – любая из компонент скорости или скаляр), полученных при осреднении исходных уравнений Навье-Стокса с использованием свойств $\overline{\phi f} \approx \bar{\phi} \bar{f}$, $\bar{f}' \approx 0$ и коммутативности операций дифференцирования и осреднения. Здесь турбулентность понимается в широком смысле как характеристика процессов подсеточных масштабов. Проблема турбулентного замыкания в вихреразрешающих моделях рассмотрена в разделе 1.6.

Проблема турбулентного замыкания. Система уравнений (2.1.5) или (2.1.6) не замкнута, поскольку содержит вновь возникшие «вихревые» слагаемые (напряжения Рейнольдса и турбулентный поток плавучести), которые необходимо каким-то образом определить. Любая параметризация или гипотеза замыкания, в том числе и те, что базируются на эмпирическом материале, должна удовлетворять определенным требованиям (Zilitinkevich et al., 1999), а именно: (i) согласованные размерности, (ii) тензорная инвариантность, (iii) сохранение симметрий и (iv) реализуемость. Иными словами, правая часть любого выражения, претендующего на физическую обоснованность, должна иметь ту же размерность, тензорно-векторную природу и свойства симметрии, что и левая часть. Более того, необходимо, чтобы рассчитываемые поля характеристик турбулентности были «реализуемыми», т. е. физически возможными (например, энергия и другие положительно определенные величины не должны принимать отрицательных значений, коэффициенты корреляции не должны превышать по модулю единицу и т.п.). Все это особенно важно в случае, когда турбулентное замыкание формулируется и проверяется для простых течений, а затем распространяются на более сложные в предположении, что общие особенности турбулентного переноса с помощью такого замыкания воспроизводятся.

Естественно попытаться дополнить уравнения Рейнольдса новыми уравнениями, описывающими изменение во времени напряжений τ_{ij} и потока плавучести $\bar{q}$. Для вывода таких уравнений можно воспользоваться (Монин и Яглом, 1965) общим методом составления уравнений для моментов, предложенным в 1924 г. Келлером и Фридманом (см. Фридман и Келлер, 1966). Пусть $u_1, u_2, \dots, u_N$ – какие-то N (не обязательно различных) гидродинамических полей турбулентного течения, а $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N$ – какие-то N (также не обязательно различных) точек в заполненной жидкостью области пространства. Производная по времени от момента N -го порядка, определяемого соотношением

$$B_{u_1 u_2 \dots u_N}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t) = \overline{\prod_{n=1}^N u_n(\vec{x}_n, t)},$$

в силу перестановочности операций осреднения и дифференцирования выражается следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} B_{u_1 u_2 \dots u_N} = \sum_{n=1}^N \frac{\partial u_n(\vec{x}_n, t)}{\partial t} \prod_{m=1, m \neq n}^N u_m(\vec{x}_m, t).$$

Если теперь исключить все производные по времени в правой части этого равенства с помощью соответствующих гидродинамических уравнений, то можно получить уравнение баланса для момента $B_{u_i u_2 \dots u_N}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)$, выражающее его производную по времени в виде комбинации моментов самих гидродинамических полей и их пространственных производных.

Если воспользоваться уравнениями Рейнольдса (2.1.3) для несжимаемой жидкости (плотность $\rho = \text{const}$) и учесть, что $\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{u}_i \bar{u}_j = \rho \bar{u}_i \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial t} + \rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t}$, то уравнение для тензора $\rho \bar{u}_i \bar{u}_j$ будет выглядеть следующим образом (для простоты записи внешние силы $\vec{F}^e$ опущены):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{u}_i \bar{u}_j + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\rho \bar{u}_i \bar{u}_j \bar{u}_\alpha + \overline{\rho u'_i u'_j u'_\alpha} + \overline{\rho u'_j u'_\alpha u'_i} + (\bar{p} \bar{u}_i \delta_{j\alpha} + \bar{p} \bar{u}_j \delta_{i\alpha}) - (\bar{u}_i \bar{\sigma}_{j\alpha} + \bar{u}_j \bar{\sigma}_{i\alpha}) \right] = \\ = \bar{p} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\bar{\sigma}_{i\alpha} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_\alpha} + \bar{\sigma}_{j\alpha} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_\alpha} \right) + \left(\overline{\rho u'_i u'_\alpha} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_\alpha} + \overline{\rho u'_j u'_\alpha} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_\alpha} \right). \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

В частности, для плотности кинетической энергии осредненного движения $E_m = \frac{1}{2} \rho \bar{u}_\beta \bar{u}_\beta$ получается уравнение

$$\frac{\partial E_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{u}_\alpha E_m + \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta u'_\beta} + \bar{p} \bar{u}_\alpha - \bar{u}_\beta \bar{\sigma}_{\alpha\beta} \right) = -\rho \varepsilon_m + \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \bar{u}_\beta}{\partial x_\alpha}, \quad (2.1.12)$$

где $\rho \varepsilon_m = \frac{1}{2} \rho \nu \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{\partial \bar{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \bar{u}_\beta}{\partial x_\alpha} \right)^2$ есть удельная (на единицу времени и единицу объема)

диссипация энергии осредненного движения под действием сил молекулярной вязкости. Выражение в скобках в левой части уравнения (2.1.12) представляет собой плотность потока энергии, обусловленного как непосредственным переносом энергии при движении частиц жидкости, так и работой сил давления, молекулярных сил внутреннего трения и «турбулентной» вязкости. Правая же часть этого уравнения показывает, что кинетическая энергия осредненного движения меняется также вследствие диссипации, приводящей к переходу части кинетической энергии в теплоту, и за счет взаимного превращения энергии осредненного и пульсационного движений (см. ниже).

Ясно, что уравнение для «мгновенного» тензора $\rho u_i u_j$ будут иметь аналогичный (2.1.11) вид, если все «пульсационные компоненты» в этом уравнении положить равными нулю. Осредняя уравнение для тензора $\rho u_i u_j$ и вычитая из полученного выражения почленно уравнение (2.1.11), можно получить следующее уравнение для тензора напряжений Рейнольдса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho u'_i u'_j} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\overline{\rho u'_i u'_j u'_\alpha} + \overline{\rho u'_i u'_j u'_\alpha} + (\overline{p' u'_i} \delta_{j\alpha} + \overline{p' u'_j} \delta_{i\alpha}) - (\overline{u'_i \sigma'_{j\alpha}} + \overline{u'_j \sigma'_{i\alpha}}) \right] = \\ = \overline{p'} \left(\frac{\partial \overline{u'_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u'_j}}{\partial x_i} \right) - \left(\overline{\sigma'_{i\alpha}} \frac{\partial \overline{u'_j}}{\partial x_\alpha} + \overline{\sigma'_{j\alpha}} \frac{\partial \overline{u'_i}}{\partial x_\alpha} \right) - \left(\overline{\rho u'_i u'_\alpha} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_\alpha} + \overline{\rho u'_j u'_\alpha} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_\alpha} \right). \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

В этом уравнении наряду со средней скоростью $\bar{u}_i$ и напряжениями Рейнольдса $\overline{\rho u'_i u'_j}$ присутствуют новые неизвестные: третьи центральные моменты $\overline{\rho u'_i u'_j u'_\alpha}$, взаимные вторые моменты полей давления и скорости вида $\overline{p' u'_i}$ и $\overline{p' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}$, а также моменты $\overline{u'_i \sigma'_{j\alpha}}$ и $\overline{\sigma'_{j\alpha} \frac{\partial u'_i}{\partial x_\alpha}}$, которые не выражаются непосредственно через напряжения Рейнольдса. Если полученную систему уравнений для средних величин и турбулентных напряжений попытаться дополнить уравнениями для третьих моментов $\overline{\rho u'_i u'_j u'_k}$, то появятся дополнительные неизвестные, в частности, четвертые моменты $\overline{\rho u'_i u'_j u'_k u'_l}$ и третьи моменты вида $\overline{p' u'_j u'_k}$ или $\overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_m} \frac{\partial u'_j}{\partial x_n} u'_k}$. Таким образом, возникает бесконечная цепочка уравнений для высших моментов и ни на каком этапе ее составления не удастся получить замкнутой системы.

После суммирования уравнений (2.1.13) по $i = j$ можно получить следующее уравнение для средней плотности кинетической энергии пульсационного движения $E_t = \frac{1}{2} \overline{\rho u'_\alpha u'_\alpha}$:

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(E_t \bar{u}_\alpha + \frac{1}{2} \overline{\rho u'_\beta u'_\beta u'_\alpha} + \overline{p' u'_\alpha} - \overline{u'_\beta \sigma'_{\alpha\beta}} \right) = -\rho \varepsilon_t - \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \bar{u}_\beta}{\partial x_\alpha}, \quad (2.1.14)$$

где $\rho \varepsilon_t = \overline{\sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u'_\beta}{\partial x_\alpha}} = \frac{1}{2} \rho \nu \sum_{i,j} \left(\overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} \right)^2$ представляет собой среднюю удельную диссипацию энергии пульсационного движения под действием вязкости. Слагаемые в скобках в левой части уравнения (2.1.14) описывают плотность потока турбулентной энергии, обусловленного переносом турбулентной энергии осредненным течением, «турбулентной вязкостью», пульсациями давления и силами внутреннего трения, соответственно. Слагаемое

$$G = -\overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \bar{u}_\beta}{\partial x_\alpha}, \quad (2.1.15)$$

которое входит в правые части уравнений (2.1.12) и (2.1.14) с разными знаками, описывает взаимные превращения энергии осредненного и пульсационного движений. Наряду с общим уравнением баланса плотности турбулентной энергии (2.1.14) часто используется также уравнение для «кинетической энергии турбулентности» $E = \frac{E_t}{\rho} = \frac{1}{2} \overline{u'_\beta u'_\beta}$:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \bar{u}_\alpha \frac{\partial E}{\partial x_\alpha} = -\overline{u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \bar{u}_\beta}{\partial x_\alpha} - \varepsilon_t + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[-\frac{1}{2} \overline{u'_\beta u'_\beta u'_\alpha} - \frac{1}{\rho} \overline{p' u'_\alpha} + \nu \overline{u'_\beta \left(\frac{\partial u'_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u'_\beta}{\partial x_\alpha} \right)} \right]. \quad (2.1.16)$$

Подход к замыканию, связанный с использованием уравнения баланса турбулентной энергии в дополнение к уравнениям Рейнольдса, был предложен Колмогоровым (1942).

В случае стратифицированной жидкости уравнение (2.1.13) следующим образом обобщается за счет включения эффектов сил плавучести (в приближении Буссинеска):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{u'_i u'_j} + \overline{u'_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \overline{u'_i u'_j} = & - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \overline{u'_i u'_j u'_\alpha} - \left(\overline{u'_i \frac{\partial \pi'}{\partial x_j}} + \overline{u'_j \frac{\partial \pi'}{\partial x_i}} \right) + \\ & + \left(\overline{u'_i b' \delta_{3j}} + \overline{u'_j b' \delta_{3i}} \right) - \left(\overline{u'_i u'_\alpha} \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_\alpha} + \overline{u'_j u'_\alpha} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_\alpha} \right) - \varepsilon_{u_i u_j}, \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

где здесь и далее через ε с соответствующими индексами обозначены слагаемые, обусловленные эффектами молекулярной вязкости. Уравнение для кинетической энергии турбулентности принимает вид

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \overline{u'_\alpha} \frac{\partial E}{\partial x_\alpha} = - \overline{u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \overline{u}_\beta}{\partial x_\alpha} + \overline{u'_\alpha b' \delta_{3\alpha}} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{1}{2} \overline{u'_\beta u'_\beta u'_\alpha} + \overline{\pi' u'_\alpha} \right) - \varepsilon, \quad (2.1.18)$$

причем считается, что $\varepsilon_{u_i u_j} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij}$. Дополнительно необходимо привлечь уравнения для составляющих турбулентного потока плавучести (слагаемое Q_b для простоты записи опущено):

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{u'_i b'} + \overline{u'_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \overline{u'_i b'} = - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \overline{u'_i b' u'_\alpha \delta_{i\alpha}} - \frac{\partial \overline{\pi' b'}}{\partial x_i} + \overline{b'^2} \delta_{3i} - \left(\overline{u'_i u'_\alpha} \frac{\partial \overline{b}}{\partial x_\alpha} + \overline{b' u'_\alpha} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_\alpha} \right) - \varepsilon_{u_i b}. \quad (2.1.19)$$

В формуле (2.1.19) фигурирует дисперсия плавучести $\overline{b'^2}$, для которой также нетрудно получить соответствующее уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{b'^2} + \overline{u'_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \overline{b'^2} = - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \overline{b'^2 u'_\alpha} - 2 \overline{b' u'_\alpha} \frac{\partial \overline{b}}{\partial x_\alpha} - \varepsilon_{bb}. \quad (2.1.20)$$

Разумеется, во вновь появившихся уравнениях (2.1.19) и (2.1.20) содержатся (в силу квадратичной нелинейности исходных уравнений) моменты третьего порядка, для которых также можно выписать соответствующие уравнения и т.д.

Иерархия методов замыкания. Говорят, что используется замыкание n -го порядка, если бесконечная цепочка уравнений Фридмана-Келлера оборвана на уравнениях для n -ых моментов, а моменты $(n+1)$ -го порядка выражены тем или иным способом через моменты предыдущих порядков. Наиболее простым является замыкание *первого порядка* (в рамках так называемой K -теории), базирующееся на гипотезе Буссинеска (1877), согласно которой

$$\overline{\phi' u'_i} = -K_\phi \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_i}, \quad (2.1.21)$$

где ϕ – любая скалярная величина или компонента скорости, а K_ϕ – новая величина размерности $\text{м}^2/\text{с}$, называемая коэффициентом турбулентной диффузии (для скаляра) или турбулентной вязкости (для скорости). В отличие от молекулярных коэффициентов диффузии χ и вязкости ν коэффициенты K_ϕ характеризуют не физические свойства

жидкости, а статистические свойства пульсационного движения и потому не являются постоянными величинами, а могут меняться в пространстве и во времени и даже принимать отрицательные значения. Последнее обстоятельство резко усложняет математическое моделирование турбулентных процессов в связи с возникающей при этом необходимостью решать некорректную (по Адамару) задачу и потому, как правило, считают, что коэффициенты K_ϕ являются неотрицательными величинами. Важно также и то, что значения этих коэффициентов во многих случаях существенно (на несколько порядков) превосходят их молекулярные аналоги.

Известно, что коэффициент молекулярной вязкости ν связан со средней скоростью молекул u_m и средней длиной их свободного пробега l_m соотношением $\nu \sim u_m l_m$. Эта же идея была использована в так называемых полуэмпирических теориях турбулентности (Монин и Яглом, 1965). Аналогичной u_m характеристикой можно считать среднее квадратичное значений пульсаций скорости $\sqrt{E}$, а вместо l_m целесообразно использовать пространственный масштаб турбулентности l – величину, описывающую среднее расстояние, на которое способны перемещаться турбулентные образования, сохраняя свою «индивидуальность». Строго говоря, такая аналогия уместна, если масштаб турбулентности много меньше характерного масштаба неоднородности среднего течения. Турбулентность может характеризоваться разными масштабами в разных направлениях. Поэтому, вообще говоря, в каждой точке потока следует задать симметричный тензор масштабов l_{ij} . Используя этот тензор и учитывая симметрию тензора $\overline{u'_i u'_j}$, можно положить (Монин, 1950):

$$\overline{u'_i u'_j} = \frac{2}{3} E \delta_{ij} - \sqrt{E} (l_{i\alpha} \bar{S}_{\alpha j} + l_{j\alpha} \bar{S}_{\alpha i}), \quad (2.1.22)$$

где $\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$. В изотропном случае ($l_{ij} = l \delta_{ij}$) формула (2.1.22) переходит в

$$\overline{u'_i u'_j} = 2 \left(\frac{1}{3} E \delta_{ij} - l \sqrt{E} \bar{S}_{ij} \right) \quad (2.1.23)$$

со скалярным (а не тензорным) коэффициентом турбулентной вязкости $K = l \sqrt{E}$.

Формулы, аналогичные (2.1.22) и (2.1.23), могут быть выписаны и в приложении к турбулентному переносу плавучести или примесей. В общем случае анизотропной турбулентности

$$\overline{b' u'_i} = -K_{bij} \frac{\partial \bar{b}}{\partial x_j}, \quad (2.1.24)$$

где компоненты тензора K_{bij} имеют смысл коэффициентов турбулентной диффузии. Часто предполагают, что $K_{bij} = \alpha_b \sqrt{E} l_{ij}$, где α_b – безразмерный параметр. Если можно пренебречь анизотропностью тензора масштабов, то (2.1.24) примет вид

$$\overline{b' u'_i} = -\alpha_b K \frac{\partial \bar{b}}{\partial x_i}. \quad (2.1.25)$$

Чисто формально соотношение (2.1.25) применяют и к уравнению для кинетической энергии турбулентности (2.1.18), полагая

$$\frac{1}{2} \overline{u'_\beta u'_\beta u'_i} + \overline{\pi' u'_i} = -\alpha_E l \sqrt{E} \frac{\partial E}{\partial x_i} = -\alpha_E K \frac{\partial E}{\partial x_i}, \quad (2.1.26)$$

где α_E – другой безразмерный коэффициент, представляющий еще одну полуэмпирическую гипотезу.

Замыкание «1.5-го» порядка (поскольку частично используется информация о вторых моментах – кинетической энергии турбулентности) будет окончательно сформулировано, если будет установлена связь между диссипацией турбулентной энергии ε и величинами l и E (или l и K). Если такая связь имеет место, то ее вид однозначно можно установить с помощью теории размерностей (Колмогоров, 1942):

$$\varepsilon = C_e \frac{E^{3/2}}{l} = C_e \frac{K^3}{l^4}, \quad (2.1.27)$$

где C_e – еще один неотрицательный безразмерный параметр.

Локальное замыкание (2.1.21) имеет ограниченную область применения, поскольку в реальных геофизических пограничных слоях наряду с трехмерной мелкомасштабной турбулентностью присутствуют крупномасштабные (сравнимые и превосходящие по размеру толщину пограничного слоя) квазиупорядоченные циркуляции (например, крупные конвективные ячейки, конвективные валики и спиралевидные протяженные вихри различной природы). Эти (когерентные) структуры определяют значительную часть интегрального переноса импульса, тепла и влаги по вертикали, приводя к тому, что соответствующие турбулентные потоки становятся нелокальными. Одним из способов учета нелокальности переноса тепла в моделях пограничного слоя является следующее обобщение формулы (2.1.21):

$$\overline{w'\theta'} = -K_\theta \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} - \gamma_\theta \right), \quad (2.1.28)$$

где γ_θ – некоторая добавка к вертикальному градиенту потенциальной температуры (Deardorff, 1966). Введение этой добавки обусловлено тем, что в лабораторных экспериментах по проникающей турбулентной конвекции, развивающейся на фоне наложенной устойчивой стратификации, были обнаружены положительные значения потока тепла $\overline{w'\theta'}$ в верхней части пограничного слоя, где $\partial \bar{\theta} / \partial z \geq 0$, т.е. имел место противогradientный перенос тепла. В работе (Deardorff, 1972), используя уравнение баланса потока тепла, в некотором приближении была получена следующая формула для расчета «противогradientа» γ_θ :

$$\gamma_\theta = \frac{g}{\theta_0} \frac{\overline{\theta'^2}}{\overline{w'^2}}.$$

При использовании замыкания 2-го порядка возникает необходимость параметризации слагаемых, связывающих пульсации давления и других гидродинамических характеристик. Подробный анализ этой проблемы дан в монографии Курбацкого (2007). В частности, показано, что формула Ротты (Rotta, 1951), вначале предложенная для корреляции градиент давления – скорость

$$-\overline{\left(u'_i \frac{\partial \pi'}{\partial x_j} + u'_j \frac{\partial \pi'}{\partial x_i}\right)} = -c_4 \frac{\varepsilon}{E} \left(\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} E \delta_{ij} \right),$$

может быть в первом приближении использована для выражения корреляции градиент давления – плавучесть

$$-\overline{b' \frac{\partial \pi'}{\partial x_i}} = -c_6 \frac{\varepsilon}{E} \overline{b' u'_i} + c_7 \left(\overline{b'^2} \delta_{3i} + \overline{b' u'_\alpha} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_\alpha} \right). \quad (2.1.29)$$

Здесь и далее для новых безразмерных констант $\{c\}$ использована система нумерации, примененная в работе (Andre, 1976). Слагаемое ε_{bb} в уравнении для дисперсии плавучести (2.1.20) рассчитывается также на основе гипотез Колмогорова

$$\varepsilon_{bb} = c_2 \frac{\varepsilon}{E} \overline{b'^2}.$$

В моделях второго порядка замыкания третьи моменты параметризуются тем или иным способом (зачастую ими пренебрегается или же используется K -теория). Наиболее последовательно это направление было реализовано в Принстонском университете США (Mellor and Yamada, 1974, 1982). Вместе с тем, замыкание типа Буссинеска (2.1.21), связывающее третьи моменты с градиентами вторых, подвергалось критике не только с позиций математического моделирования (Zeman and Lumley, 1976), но и с точки зрения анализа данных наблюдений (Andre, 1976). В частности, Андре на основе экспериментальных данных (Willis and Deardorff, 1974) рассчитал вертикальный поток кинетической энергии турбулентности, используя гипотезу Буссинеска (2.1.21), и показал, что в нижней части конвективного слоя этот поток имеет противоположный тому, что наблюдалось, знак. В верхней части конвективного слоя знаки совпадали, но величина потока была сильно занижена по сравнению с данными наблюдений.

Были разработаны модели *третьего порядка замыкания*, в которых моменты четвертого порядка связывались со вторыми моментами с помощью гипотезы квазинормальной аппроксимации Миллионщикова (1941):

$$\overline{\alpha' \beta' \gamma' \delta'} \approx \overline{\alpha' \beta'} \cdot \overline{\gamma' \delta'} + \overline{\alpha' \gamma'} \cdot \overline{\beta' \delta'} + \overline{\alpha' \delta'} \cdot \overline{\beta' \gamma'}. \quad (2.1.30)$$

Это соотношение точно выполняется в случае нормального распределения вероятностей для гидродинамических величин. Однако, в отсутствие диссипативных механизмов в уравнениях для третьих моментов, использование формулы (2.1.30) приводит к нефизичному развитию процесса, характеризующемуся появлением отрицательных значений составляющих кинетической энергии турбулентности (Ogura, 1963), поскольку слишком большие третьи моменты могут переносить энергию со скоростью большей, чем она генерируется. В работе (Andre et al., 1976) с целью ограничить рост тройных моментов и исходя из того, что эти величины должны удовлетворять «условиям реализуемости», была предложена так называемая клиппинг-аппроксимация. Поскольку любая тройная корреляция $\overline{\alpha' \beta' \gamma'}$ может быть представлена в виде

$$\overline{\alpha' \beta' \gamma'} = \overline{\alpha' (\beta' \gamma' - \beta' \gamma')}, \quad (2.1.31)$$

то используя неравенство Шварца (Воеводин и Кузнецов, 1984) для правой части формулы (2.1.31), можно получить

$$|\overline{\alpha'\beta'\gamma'}| \leq \overline{\alpha'^2}^{1/2} \left(\overline{\beta'^2\gamma'^2} - \overline{\beta'\gamma'^2} \right)^{1/2}. \quad (2.1.32)$$

Если теперь воспользоваться соотношением (2.1.30), то

$$\overline{\beta'^2\gamma'^2} = \overline{\beta'^2} \cdot \overline{\gamma'^2} + 2\overline{\beta'\gamma'^2},$$

и в силу симметрии условие реализуемости (2.1.32) приводит к соотношениям

$$|\overline{\alpha'\beta'\gamma'}| \leq \min \left\{ \begin{aligned} &\left[\overline{\alpha'^2} \left(\overline{\beta'^2} \cdot \overline{\gamma'^2} + \overline{\beta'\gamma'^2} \right) \right]^{1/2} \\ &\left[\overline{\beta'^2} \left(\overline{\alpha'^2} \cdot \overline{\gamma'^2} + \overline{\alpha'\gamma'^2} \right) \right]^{1/2} \\ &\left[\overline{\gamma'^2} \left(\overline{\alpha'^2} \cdot \overline{\beta'^2} + \overline{\alpha'\beta'^2} \right) \right]^{1/2} \end{aligned} \right. . \quad (2.1.33)$$

В настоящее время замыкания третьего порядка, в которых используется полный набор дифференциальных уравнений для третьих моментов (не выписаны в силу их громоздкости, но могут быть найдены в цитированной выше литературе), имеют скорее исторический интерес, чем практическое значение. Известны модели промежуточной сложности, отличающиеся тем, что в них используются различного уровня алгебраические замыкания. В частности, в работе (Курбацкий и Курбацкая, 2006) представлена трехпараметрическая модель турбулентности для атмосферного пограничного слоя атмосферы над урбанизированной поверхностью. Для вычисления турбулентных потоков импульса и тепла авторами цитированной работы использованы явные алгебраические соотношения, полученные из соответствующих уравнений переноса в приближении слабо равновесной турбулентности, а также прогностические уравнения для кинетической энергии турбулентности, скорости ее диссипации и дисперсии температуры. Как правило, такой подход эффективен в вычислительном отношении и вполне пригоден для решения многих прикладных задач.

2.2. Процессы обмена в приземном слое атмосферы

Уравнения Рейнольдса позволяют сформулировать выводы о наличии связей между различными статистическими характеристиками турбулентности, но при их интегрировании возникают трудности, обусловленные проблемой замыкания. При выборе решений этих уравнений, имеющих физический смысл, приходится задавать некоторую дополнительную информацию, например, в виде каких-то функций, описывающих свойства турбулентности. В некоторых случаях вид таких функций может быть найден исходя из соображений теории размерности и данных экспериментов. Теории турбулентности, в которых наряду со строгими уравнениями гидромеханики используются также дополнительные эмпирические связи, установленные по экспериментальным данным или же выведенные с помощью качественных рассуждений и проверенные на опыте, называются *полуэмпирическими теориями*. Хотя такого рода построения не являются строгими, но они сыграли большую роль в развитии

представлений о турбулентных течениях (Boussinesq, 1897, Taylor, 1915, 1932, Prandtl, 1925, Kármán, 1930) и до сих пор используются в исследованиях по турбулентности.

Аэродинамический метод. Известно, что в приземном слое (так называемом слое постоянных потоков) наблюдаемые вертикальные распределения метеорологических величин имеют логарифмические асимптотики при приближении к поверхности Земли. При подходящем выборе коэффициентов турбулентного обмена выражения вида (2.1.21) обеспечивают эти асимптотики, но при их численном решении возникают чрезвычайно жесткие ограничения на вертикальное разрешение в слое постоянных потоков. В численных моделях циркуляции атмосферы принят компромиссный подход. Расчет эволюции слоя, переходного от приземного к свободной атмосфере, проводится с использованием формулы (2.1.21), а решение в слое постоянных потоков выражается в виде аналитических зависимостей, полученных в результате анализа экспериментальных данных на основе теории подобия Мони́на-Обухова (1954). "Склейка" решений на границе раздела между слоем постоянных потоков и переходным слоем проводится на основе предположения о непрерывности рассчитываемых метеорологических величин (скорость ветра, потенциальная температура и удельная влажность) и их потоков.

Согласно теории подобия Мони́на-Обухова, безразмерные вертикальные профили скорости ветра, температуры и влажности в приземном слое описываются некоторыми универсальными функциями, зависящими от безразмерной переменной z/L_{MO} , где L_{MO} – так называемый масштаб длины Мони́на - Обухова. В практическом плане, эта процедура эквивалентна аэродинамическому методу, сводящемуся к расчету приповерхностных потоков импульса, тепла и влаги с помощью коэффициентов обмена, значений скорости ветра и дефицитов соответствующих субстанций. Асимптотическое поведение универсальных функций (при сильно устойчивой или сильно неустойчивой стратификации плотности) изучено достаточно подробно, но требуются данные наблюдений, чтобы восстановить их поведение для промежуточных режимов. Этот подход хорошо зарекомендовал себя в условиях статистически однородной подстилающей поверхности, прост в реализации и было вполне естественным использовать его в атмосферных моделях. Вместе с тем, в пределах ячейки сетки модели подстилающая поверхность редко бывает однородной, а наличие растительного и снежного покрова, специфика турбулентного перемешивания внутри растительности, особенно, в лесу, радиационные процессы, сальтация и диффузия частиц почвы и снега в атмосферу, перенос брызг с поверхности океана в штормовых условиях – все это существенно воздействует на процессы турбулентного взаимодействия атмосферы с подстилающей поверхностью.

Турбулентные потоки импульса $\tau_{\lambda}, \tau_{\varphi}$, явного тепла H_s и влаги E_s на поверхности Земли определяются с помощью аэродинамического метода:

$$\begin{aligned}\tau_{(\lambda, \varphi)} &= \overline{\rho(u', v')w'} = -\rho_h C_d U_h(u_h, v_h), \\ H_s &= c_p \overline{\rho w' \theta'} = -c_p \rho_h C_H U_h(\theta_h - \theta_s), \\ E_s &= \overline{\rho w' q'} = -\rho_h C_E U_h[q_h - r_s q_{\max}(p_s, T_s)],\end{aligned}\tag{2.2.1}$$

где $U = \sqrt{u^2 + v^2}$ – модуль скорости ветра, $\theta = (1 + 0.61q)T(p_0/p)^{R/c_p}$ – «влажная» потенциальная температура, q – удельная влажность, r – относительная влажность, $q_{\max}$ – насыщающее значение удельной влажности; C_d , C_H , C_E – коэффициенты сопротивления, тепло- и влагообмена, соответственно. Индекс h указывает, что соответствующие величины рассчитываются на верхней границе слоя постоянных потоков, в качестве которой принимается высота самого нижнего слоя атмосферной модели; индекс s относится к функциям, определенным на подстилающей поверхности.

Коэффициенты сопротивления C_d и тепловлагообмена C_H, C_E связаны с интегральными коэффициентами переноса импульса C_m , тепла C_θ и влаги C_q соотношениями $C_d = C_m^2, C_H = C_m C_\theta, C_E = C_m C_q$. В свою очередь, интегральные коэффициенты переноса $C_i (i = m, \theta, q)$ в соответствии с теорией подобия Монина-Обухова представляются в виде

$$C_i = \frac{\kappa}{\ln(h/z_{0i}) - \psi_i(\zeta)}, \quad (2.2.2)$$

где $\zeta = z/L_{MO}$ – безразмерная высота, ψ_i – соответствующие универсальные функции, z_{0i} – параметр шероховатости, κ – постоянная Кармана. По определению, масштаб Монина-Обухова имеет вид

$$L_{MO} = \frac{\rho_0}{g} \frac{u_*^3}{\kappa \overline{\rho' w'}}, \quad (2.2.3)$$

где $u_* = \sqrt[4]{\overline{u' w'^2} + \overline{v' w'^2}}$ – скорость трения, $-\overline{g \rho' w'}/\rho_0$ – поток плавучести, ρ_0 – некоторое стандартное значение плотности. Профили скорости ветра и скаляра (например, температуры) в слое постоянных потоков могут быть записаны при этом в следующем виде:

$$\bar{u}(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_{0m}} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L_{MO}} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_{0m}}{L_{MO}} \right) \right], \quad (2.2.4)$$

$$\bar{T}(z) = \bar{T}(z_{0\theta}) + \frac{T_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_{0\theta}} \right) - \Psi_\theta \left(\frac{z}{L_{MO}} \right) + \Psi_\theta \left(\frac{z_{0\theta}}{L_{MO}} \right) \right], \quad (2.2.5)$$

где Ψ_m и Ψ_θ – интегральные универсальные функции, z_{0m} и $z_{0\theta}$ – параметры шероховатости для импульса и скаляра (температуры в данном случае), соответственно. В качестве примера можно заметить, что в климатической модели Института вычислительной математики РАН (Марчук и др., 1984, Алексеев и др., 1998, Дымников и др., 2005) использованы универсальные функции, представляющие собой комбинацию (Казakov и Лыкосов, 1982) получивших широкое распространение эмпирических интерполяционных функций Бусинджера-Дайера (Businger et al., 1971) с законом "степени -1/3". Эти функции асимптотически описывают режим свободной конвекции и позволяют избежать нереально заниженных значений турбулентных потоков при малых скоростях ветра.

Необходимо сделать одно замечание по поводу универсальных функций. Взаимодействие атмосферы с подстилающей поверхностью в высоких широтах в зимний период времени происходит на фоне как правило устойчивой стратификации пограничного слоя. В условиях дефицита коротковолновой радиации поверхность снега выхолаживается (особенно интенсивно – при безоблачном небе), что приводит к дальнейшему усилению устойчивости приземного слоя и, как следствие, к ослаблению компенсирующего этот процесс турбулентного переноса явного и скрытого тепла. В рамках традиционного подхода интегральные универсальные функции Ψ_i при устойчивой стратификации, то есть при $\zeta \geq 0$, задаются следующим образом:

$$-\Psi_i = \beta(\zeta - \zeta_{0i}), \quad (2.2.6)$$

где $\zeta_{0i} = z_{0i} / L_{MO}$, а $\beta \approx 5$ – эмпирический безразмерный коэффициент. Как показывают результаты обработки данных наблюдений (Businger et al., 1971), формулы (2.2.6) справедливы лишь для относительно небольших значений $0 < \zeta < 2$. В работе (Beljaars and Holtslag, 1991) предложены более общие выражения для универсальных функций:

$$-\Psi_m = a\zeta + b\left(\zeta - \frac{c}{d}\right)e^{-d\zeta} + \frac{bc}{d}, \quad (2.2.7)$$

$$-\Psi_\theta = \left[\left(1 + \frac{2}{3}a\right)\zeta\right]^{\frac{3}{2}} + b\left(\zeta - \frac{c}{d}\right)e^{-d\zeta} + \frac{bc}{d} - 1, \quad (2.2.8)$$

где $a = 1$, $c = 5$, $d = 0.35$, а $b = (c-a)/(c+1)$. Нетрудно видеть, что функции (2.2.7), (2.2.8), нелинейные по ζ , близки к традиционным линейным формулам (с $\beta = c$) при малых значениях ζ . Особый интерес представляет так называемое потоковое число Ричардсона Rf , связанное с ζ и функцией Ψ_m соотношением

$$Rf = \frac{\zeta}{1 - \zeta d \Psi_m / d\zeta}.$$

Легко убедиться, что $\lim_{\zeta \rightarrow \infty} Rf = Rf_\infty$, причем "критическое значение" $Rf_\infty = \beta^{-1}$ для функции Ψ_m , задаваемой формулой (2.2.6), и $Rf_\infty = a^{-1}$ – в более общем случае (2.2.7). Согласно теоретическим представлениям (Монин и Обухов, 1954), стационарная развитая турбулентность над статистически однородной подстилающей поверхностью не может существовать при $Rf > 1$. Приведенные выше значения констант β и a удовлетворяют этому требованию. Следует, правда, заметить, что в реальных условиях подстилающая поверхность редко бывает однородной, а происходящие над ней процессы – стационарными. В настоящее время общепризнано, что в устойчиво стратифицированных течениях атмосферного пограничного слоя турбулентное перемешивание существует при любых числах Ричардсона, в том числе при $Ri \gg 1$, и обратное турбулентное число Прандтля Ri_t^{-1} убывает с увеличением плотностной устойчивости течения (Zilitinkevich, 2010). Вместо теоретических универсальных функций, зависящих от ζ , для расчета непосредственно коэффициентов сопротивления и тепловлагообмена часто используются экспериментальные («подгоночные») зависимости от характеристик состояния атмосферы (скорости ветра, в первую очередь) или от числа Ричардсона.

Шероховатость подстилающей поверхности предполагается различной при расчете универсальных функций для импульса и для тепла и влаги. Для суши и льдов параметр динамической шероховатости z_m считается неизменным во времени, но, вообще говоря, зависящим от широты и долготы. Для океанской поверхности величина z_{0m} может быть вычислена по формуле Зилитинкевича (1974):

$$z_{0m} = 0.111 \frac{\nu}{u_*} + 0.0144 \frac{u_*^2}{g},$$

параметрически учитывающей то, что морская поверхность является неполностью шероховатой (ν – коэффициент молекулярной вязкости воздуха). Для расчета

"термической шероховатости" $z_{0\theta}$ можно использовать следующие соотношения (Казаков и Лыкозов, 1982):

$$\ln \frac{z_{0m}}{z_{0\theta}} = \begin{cases} -2.43 & \text{при } \text{Re} \leq 0.111 \\ 0.83 \ln \text{Re} - 0.6 & \text{при } 0.111 < \text{Re} \leq 16.3, \\ 0.49 \text{Re}^{0.45} & \text{при } \text{Re} > 16.3 \end{cases}$$

где $\text{Re} = u_* z_{0m} / \nu$ – «шероховатое» число Рейнольдса.

Взвешенные частицы. При большой скорости ветра, например, $\bar{u} > 8$ м/с, во взаимодействии атмосферы с подстилающей поверхностью возникают новые эффекты. На океане развитие поверхностного волнения приводит к тому, что в штормовых условиях не только меняется шероховатость поверхности, но и возникает приповерхностный слой с большим количеством капель воды. На суше в результате действия сил напряжения трения мелкие частицы (снега, пыли, песка и т.д.) также отрываются от подстилающей поверхности и находятся в потоке во взвешенном состоянии. Если концентрация частиц достаточно велика, то среду можно рассматривать как двухфазную жидкость, плотность которой определяется, в том числе, и концентрацией частиц. Существенное уменьшение аэродинамического сопротивления (Barenblatt and Golitsyn, 1974, Wamser and Lykossov, 1995, Lykossov, 2001) в такого рода течениях сказывается и на характере турбулентного переноса во внешней (по отношению к приповерхностному слою) области пограничного слоя атмосферы.

Плотность ρ смеси «воздух – частицы» может быть представлена следующим образом:

$$\rho = \rho_a (1 - C) + \rho_p C = \rho_a (1 + \varepsilon_e C), \quad (2.2.9)$$

где ρ_a – плотность воздуха, ρ_p – плотность частиц, $C(z)$ – объемная концентрация частиц, а $\varepsilon_e = (\rho_p - \rho_a) / \rho_a$. Масштаб Монина-Обухова для этих условий может быть записан в виде

$$L_{MO} = \frac{\rho_a (1 + \varepsilon_e \bar{C}) u_*^3}{\kappa g [\overline{\rho'_a w' (1 - \bar{C})} + \rho_a \varepsilon_e \overline{w' C'}]}. \quad (2.2.10)$$

В отсутствие частиц ($\bar{C} \equiv 0$ и $\overline{w' C'} \equiv 0$) соотношения (2.2.9) и (2.2.10) с учетом соотношения $\rho' / \rho_0 \approx -T' / T_0$ приводят к полученному Мониним и Обуховым (1954) выражению

$$L_{MO} = - \frac{T_0 u_*^3}{\kappa g \overline{w' T'}}.$$

В случае же термически безразличной стратификации ($\overline{w' T'} \equiv 0$) параметр L_{MO} следующим образом выражается через характеристики частиц:

$$L_{MO} = \frac{(1 + \varepsilon_e \bar{C}) u_*^3}{\kappa g \varepsilon_e w' C'} . \quad (2.2.11)$$

Если воспользоваться уравнением баланса концентрации частиц в стационарном приближении

$$\frac{d}{dz} (\overline{w' C'} - w_g \bar{C}) = 0 , \quad (2.2.12)$$

где w_g – скорость их гравитационного оседания, а также учесть, что $\bar{C} \rightarrow 0$ и $\overline{C' w'} \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$, то $\overline{w' C'} = w_g \bar{C}$ и выражение (2.2.11) для масштаба L_{MO} может быть переписано в виде

$$L_{MO} = \frac{(1 + \varepsilon_e \bar{C}) u_*^3}{\kappa g w_g \varepsilon_e \bar{C}} . \quad (2.2.13)$$

Поскольку в таком случае $L_{mo} > 0$, т.е. стратификация плотности устойчива, то можно воспользоваться формулой (2.2.6) для универсальных функций. Предполагая, что $\varepsilon_e \bar{C} \ll 1$, уравнение для средней скорости (2.2.4) можно записать следующим образом:

$$K \frac{d\bar{u}}{dz} = u_*^2, \quad K = \kappa u_* z \left(1 + \frac{\beta \kappa g w_g \varepsilon_e z \bar{C}}{u_*^3} \right)^{-1} . \quad (2.2.14)$$

Принимая $\overline{w' C'} = -K d\bar{C} / dz$, уравнение для средней концентрации частиц может быть записано в виде

$$\frac{d\bar{C}}{dz} + \frac{w_g \bar{C}}{\kappa u_* z} \left(1 + \frac{\beta \kappa g w_g \varepsilon_e z \bar{C}}{u_*^3} \right) = 0 . \quad (2.2.15)$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее граничному условию $\bar{C} = \bar{C}_r$ на некоторой высоте $z = z_r$, записывается следующим образом (Taylor and Dyer, 1977):

$$\bar{C}(z) = \frac{\bar{C}_r (1 - \omega) (z / z_r)^{-\omega}}{1 - \omega + \tilde{\beta} [(z / z_r)^{1-\omega} - 1]} , \quad (2.2.16)$$

где $\omega = w_g / \kappa u_*$, а $\tilde{\beta} = \beta \kappa^2 g \varepsilon_e z_r \bar{C}_r / u_*^2$. При $\omega \rightarrow 1$ решение (2.2.16) сходится к

$$\bar{C}(z) = \frac{\bar{C}_r (z / z_r)^{-1}}{1 + \tilde{\beta} \ln(z / z_r)} . \quad (2.2.17)$$

Зная распределение $\bar{C}(z)$, из уравнения (2.2.14) можно получить профиль средней скорости

$$\bar{u}(z) = \bar{u}_r + \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_r}\right) + \frac{u_*}{\kappa} \begin{cases} \omega^{-1} \ln\left(1 + \frac{\tilde{\beta}\omega^2}{1-\omega} \left[\left(\frac{z}{z_r}\right)^{1-\omega} - 1\right]\right), & \text{если } \omega \neq 1 \\ \ln\left[1 + \tilde{\beta} \ln\left(\frac{z}{z_r}\right)\right] & \omega = 1 \end{cases} \quad (2.2.18)$$

Если $z_r = z_0$, $u_r = 0$ и $\tilde{\beta} = 0$, то решение (2.2.18) совпадает с рассмотренным ранее логарифмическим профилем. Эффект частиц определяется дополнительным логарифмическим слагаемым в формуле (2.2.18). Поскольку $\tilde{\beta} > 0$ и $\omega > 0$, то при одном и том же значении динамической скорости u_* значение средней скорости $\bar{u}$ должно быть больше в случае присутствия в потоке взвешенных частиц. Это означает, что коэффициент сопротивления должен быть меньше по сравнению с тем, что характеризует чистый поток.

Для того, чтобы оценить эффект взвешенных частиц количественно, можно положить $u_* = 0.4$ м/с в качестве типичного значения динамической скорости, $r = 10$ мкм как характерное значение радиуса частиц и $\varepsilon_e = 10^3$. Используя формулу Стокса

$$w_g = \frac{2\varepsilon_e g r^2}{9\nu}, \quad (2.2.19)$$

можно получить $w_g = 0.016$ м/с и $\omega = 0.1$. Полагая $z_r = 0.18$ м и $z_0 = 10^{-4}$ м, а также считая, что на профиль ветра между z_0 и z_r частицы влияют не сильно, можно получить следующую оценку: при изменении значений $\bar{C}_r$ от 10^{-5} до 10^{-4} , скорость ветра на высоте 10 м возрастает на 4 – 35% по сравнению с течением без взвешенных частиц.

2.3. Взаимодействие атмосферы с сушей и криосферой

В первых глобальных трехмерных климатических моделях (см., например, Manabe and Bruyan, 1969) процессы тепловлагообмена между атмосферой и поверхностью суши рассматривались, следуя (интегральному) энергобалансовому подходу Будыко (1956). Использовалось лишь уравнение теплового баланса, связывающего потоки энергии с температурой поверхности. Испарение выражалось в виде простой функции от потенциально доступного для растительности влагосодержания и некоторого коэффициента, отражающего термическое состояние почвы. Доступное влагосодержание задавалось явно и варьировалось, в зависимости от осадков и испарения, от значения, характерного для точки увядания, до значения полевой влагоемкости. Любое превышение полевой влагоемкости интерпретировалось как составляющая стока.

Дж. Дирдорф (Deardorff, 1978) предложил альтернативный подход с упором на суточный временной масштаб и явное представление растительности. В его модели впервые учтены различия между транспирацией, испарением с кроны деревьев и с оголенной почвы. Он также использовал не однослойное представление почвы, позволявшее рассчитывать вертикальные профили температуры и влажности. Этот подход затем был использован в ряде схем, описывающих взаимодействие атмосферы и поверхности суши: SiB (Simple Biosphere model, Sellers et al., 1986), BATS (Biosphere-Atmosphere Transfer Scheme, Dickinson et al., 1993) и CLASS (Canadian Land Surface Scheme, Verseghy et al., 1993). Дальнейшее развитие этого подхода проводилось с учетом

фазовых переходов влаги на основе рассмотрения различных ее физических состояний в почве (в том числе, в условиях сезонного промерзания и вечной мерзлоты) и в снежном покрове (Володин и Лыкосов, 1998, Володина и др., 2000, Мачульская и Лыкосов, 2002), а также в растительном покрове (Крупчатников и др., 2000).

При математическом описании тепловлагопереноса в почве все физические процессы предполагаются одномерными, поскольку вертикальные градиенты температуры и влаги в различных ее состояниях, как правило, значительно превосходят горизонтальные. Перенос тепла и влаги носит при этом диффузионный и взаимосвязанный характер; поток каждой субстанции (температура, водяной пар, жидкая влага) обусловлен не только наличием соответствующего градиента, но вызывается также неравномерностью распределения других характеристик состояния почвы. Уравнения тепловлагопереноса в почве с учетом корневой системы растительности могут быть записаны следующим образом, (Лыкосов и Палагин, 1978, Палагин, 1981):

$$\begin{aligned}\rho c \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} + \rho (L_i F_i - L_v F_v), \\ \frac{\partial W}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \lambda_w \left(\frac{\partial W}{\partial z} + \delta \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial \gamma}{\partial z} - F_i - F_v - R_f - R_r, \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \lambda_v \frac{\partial V}{\partial z} + F_v, \\ \frac{\partial I}{\partial t} &= F_i.\end{aligned}\tag{2.3.1}$$

Здесь z – направленная вниз вертикальная координата; T – температура, °C; W – количество жидкой влаги в долях от массы сухой почвы; V – количество водяного пара; I – количество льда; λ_T – коэффициент теплопроводности; λ_w и λ_v – коэффициенты диффузии воды и водяного пара, соответственно; δ – коэффициент термовлагопроводности за счет градиента температуры; ρ – плотность почвы; c – ее теплоемкость; γ – скорость инфильтрации воды под действием силы тяжести; F_i – скорость изменения количества жидкой влаги и льда за счет процессов замерзания/таяния; F_v – скорость изменения содержания водяного пара и воды за счет процессов испарения/конденсации; R_f – изменение влагосодержания за счет горизонтального стока воды; R_r – скорость всасывания воды корневой системой растительности. Уравнения (2.3.20) решаются в слое $(0, H)$, где H соответствуют горизонту в почве, на котором отсутствуют внутрисезонные изменения температуры.

Если поверхность почвы покрыта снегом толщиной h , то для описания процесса теплопереноса в слое $(-h, 0)$ привлекаются следующие уравнения (Володина и др., 2000):

$$\begin{aligned}\rho_{sn} c_{sn} \frac{\partial T_{sn}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \lambda_{sn} \frac{\partial T_{sn}}{\partial z} + \rho_{sn} L_i F_{sn}, \\ \frac{\partial W_{sn}}{\partial t} &= \frac{\partial \gamma_{sn}}{\partial z} - F_{sn},\end{aligned}\tag{2.3.2}$$

в которых T_{sn} – температура снега, W_{sn} – его влагосодержание, а ρ_{sn} , c_{sn} , λ_{sn} и γ_{sn} представляют собой его плотность, теплоемкость, коэффициент теплопроводности и гидравлическую проводимость, соответственно. Слагаемое F_{sn} аналогично по своему физическому смыслу слагаемому F_i в уравнениях для почвы. Высота снежного покрова h

связана с его водноэквивалентной толщиной, которая, в свою очередь, определяется осадками, испарением и таянием снега. При этом учитывается, что в течение всего периода существования снежного покрова плотность снега может значительно изменяться со временем вследствие процессов метаморфизма и гравитационного оседания. Кроме того, при расчете потока влаги за счет испарения приняты во внимание эффекты растительности.

В качестве граничных условий для системы (2.3.1) – (2.3.2) выбраны следующие формулировки. На нижней границе расчетной области $z = H$ задается отсутствие диффузионных потоков воды и пара и считается известным поток тепла (равный, вообще говоря, значению геотермического потока). На верхней границе $z = -h$ (почва покрыта снегом) или $z = 0$ (отсутствует снежный покров) предполагаются известными количество водяного пара в воздухе, поток жидкой влаги, обусловленный дождевыми осадками, таянием снега и испарением с поверхности почвы, и температура поверхности раздела "атмосфера-снег/почва". В свою очередь, эта температура находится из уравнения теплового баланса, включающего компоненты радиационного баланса, поток тепла из/в снег или почву и потоки явного и скрытого тепла (см. ниже). В качестве начальных условий используются либо наблюдаемые профили соответствующих величин, либо результаты специальной процедуры инициализации.

Суммарная теплоемкость почвы предполагается зависящей от содержания воды и льда (Палагин, 1981):

$$c = c_0 + c_w W + c_i I, \quad (2.3.3)$$

где c_0 , c_w и c_i – теплоемкость, соответственно, сухого грунта, воды и льда, а коэффициент теплопроводности – от потенциала почвенной влаги (McCumber and Pielke, 1981):

$$\lambda_r = 418.7 \max[\exp(-\log_{10}(-\psi) - 2.7), 0.00041]. \quad (2.3.4)$$

Потенциал почвенной влаги ψ в этой формуле, коэффициент диффузии воды в почве λ_w и гидравлический поток γ вычисляются согласно работе (Clapp and Hornberger, 1978):

$$\psi = \psi_{\max} \left(\frac{W_{\max}}{W} \right)^b, \quad \lambda_w = \lambda_{\max} \left(\frac{W}{W_{\max}} \right)^{b+2}, \quad \gamma = \gamma_{\max} \left(\frac{W}{W_{\max}} \right)^{2b+3}, \quad (2.3.5)$$

где b – безразмерный показатель Клаппа-Хорнбергера, $W_{\max}$ – максимальное содержание жидкой воды в слое, определяемое соотношением

$$W_{\max} = \frac{\Pi - \rho_l I / \rho_i}{\rho} \rho_w.$$

Здесь Π – пористость почвы ($\text{м}^3/\text{м}^3$), ρ_i, ρ_w – плотность льда и воды, соответственно. Как пористость, так и другие параметры, используемые в приведенных выше формулах, зависят от типа почвы и их значения для каждого типа приведены в (Алексеев и др., 1998).

Теплоемкость снега c_{sn} считается равной теплоемкости льда c_i , а его плотность ρ_{sn} и теплопроводность λ_{sn} предполагаются зависящими от глубины и рассчитываются по

эмпирическим формулам (Палагин, 1981). В атмосферной модели рассчитывается водноэквивалентная толщина снега S_{sn} :

$$\partial S_{sn} / \partial t = P - M - L_i E_s / \rho_w, \quad (2.3.6)$$

где P – интенсивность осадков при температуре подстилающей поверхности меньшей 0° , M – интенсивность снеготаяния, $L_i E_s$ – поток скрытого тепла на поверхности снега. При этом высота снежного покрова h связана с его водноэквивалентной толщиной S_{sn} соотношением

$$\rho_w S_{sn} = \int_{-h}^0 \rho_{sn} dz. \quad (2.3.7)$$

Для расчета твердой фазы при $T < 0$ пренебрегается вкладом водяного пара и принимается во внимание эффект гистерезиса при замерзании/оттаивании воды в почве, т.е., считается, что лед тает при 0°C , но жидкая вода может находиться в почве в переохлажденном состоянии, так что процесс ее замерзания происходит постепенно при понижении температуры. С этой целью используется эмпирическая зависимость для максимального количества жидкой влаги W_{nf} , которое может оставаться незамерзшим при отрицательной температуре (Глобус, 1969):

$$W_{nf} = W_\infty + (W_0 - W_\infty) \exp(T / T_0), \quad (2.3.8)$$

где $T_0 = 3^\circ\text{C}$, W_0 – количество незамерзающей воды при 0°C , а W_∞ – при очень низкой температуре (формально при $T \rightarrow -\infty$). Эти величины также зависят от типа почвы.

При прогревании промерзшей почвы в модели реализован алгоритм расчета ее оттаивания. Вкладом водяного пара в фазовые переходы влаги в этом процессе также пренебрегается. Если же лед отсутствует, то в рассмотрение вводятся процессы испарения воды и конденсации водяного пара в почвенных порах. При этом учитывается тот факт, что в большинстве реальных случаев даже в слабо увлажненной почве водяной пар является насыщенным (Палагин, 1981) и если влажность почвы превышает максимальную гигроскопичность ($W > 0.04$), то представляется возможным использовать эмпирическое соотношение типа уравнения Меттса - Боуэна (Mattes and Bowen, 1963):

$$V = V_{\max} = V_d \Pi_0 \exp(T / T_d), \quad (2.3.9)$$

где $V_d = 4.85 \cdot 10^{-6}$ кг/кг, $T_d = 16.7^\circ\text{C}$, $\Pi_0 = \Pi - \rho W / \rho_w$ – свободная пористость. За счет высушивания почвы W может оказаться меньше максимальной гигроскопичности и в этом случае используется (Лыков и Палагин, 1978) кривая сорбции, связывающая содержание водяного пара с W :

$$V = 0.4 V_{\max} (1 + 7.9 W^{1/2}). \quad (2.3.10)$$

Расчет горизонтального стока влаги R_f складывается из поверхностного R_{f1} и подповерхностного стока R_{f2} . В основе схемы параметризации этих процессов лежат алгоритмы, использованные в модели (DKRZ, 1992) Института метеорологии общества Макса Планка (Гамбург, ФРГ).

Температура поверхности суши или снега T_s вычисляется в предположении, что скорость изменения со временем теплосодержания верхнего слоя почвы толщиной Δz (например, в 1 см) определяется бюджетом потоков тепла

$$c\rho\Delta z\partial T_s/\partial t = (1-\alpha)S_g + F_g - \varepsilon\sigma_{SB}T_s^4 - LE_s - H_s + B_{z=\Delta z}, \quad (2.3.11)$$

где S_g – приходящая коротковолновая радиация, $\varepsilon\sigma_{SB}T_s^4$ – излученная длинноволновая радиация, LE_s – поток скрытого тепла, H_s – поток явного тепла, B – поток тепла в почве, σ_{SB} – постоянная Стефана-Больцмана, ε – коэффициент серости, α – альбедо поверхности. В рассматриваемой схеме тепловлагоденоса в системе "растительность - почва" возможное влияние растительности на параметр шероховатости не учитывается и основное внимание уделяется процессу испарения. Предполагается, что какая-либо приписанная к суше ячейка конечно-разностной сетки модели общей циркуляции атмосферы может включать участки оголенной почвы, покрытые снегом, занятые внутренними водами, содержащие сухую и увлажненную растительность различных типов. Расчет потока влаги E за счет испарения вычисляется согласно (DKRZ, 1992) по формуле

$$E = \rho_a \sum_{i=1}^N \mu_i (q_i - q_a) / R_i, \quad (2.3.12)$$

где μ_i – доля площади ячейки, занятая i -ым видом поверхности, q_i – эффективная влажность на поверхности, R_i – сопротивление. Для заснеженной и водной поверхности, а также увлажненного растительного покрова, величина q_i равна насыщающему значению удельной влажности, рассчитанному при температуре поверхности $q_{\max}(T_s)$. В случае же открытой почвы q_i вычисляется аналогично (DKRZ, 1992) в зависимости от влагосодержания почвы. В обоих этих случаях величина $R_i = 1/(C_T U)$, где U – модуль скорости ветра на ближайшем к поверхности расчетном уровне в модели атмосферы, а C_T – коэффициент тепловлагообмена. Для сухой растительности также предполагается, что $q_i = q_{\max}$, но сопротивление R_i определяется согласно (Sellers et al., 1986) в виде

$$R_i = \frac{1}{C_T U} + \frac{R(S_{ph})}{F_T F_q F_W}, \quad (2.3.13)$$

где

$$\frac{1}{R(S_{ph})} = \frac{1}{kc_i} \left[\frac{b_i}{d_i S_{ph}} \ln \left(\frac{d_i e^{kLt} + 1}{d_i + 1} \right) - \ln \left(\frac{d_i + e^{-kLt}}{d_i + 1} \right) \right]. \quad (2.3.14)$$

Здесь S_{ph} – часть достигающей поверхности коротковолновой радиации (в модели 55 процентов), используемая в процессе фотосинтеза; a_i , b_i , c_i – параметры, зависящие от типа растительности, $d_i = (a_i + b_i c_i) / c_i S_{ph}$, $k = 0.9$, Lt – листовой индекс. Функции F , определяющие зависимость сопротивления от температуры и влажности воздуха и влагосодержания почвы, приведены в (Sellers et al., 1986). Перечень всех параметров, зависящих от типов растительности, и их значения для каждого типа содержится в публикации Алексеева с соавторами (1998).

В настоящее время наблюдается переход от статических моделей распределения типов растительности к динамическим моделям растительного покрова, в которых учитывается приспособление функциональных типов растительности к изменяющимся условиям природной среды и, тем самым, «включаются» обратные связи в системе

«растительность-климат». В климатическую модель ИВМ РАН интегрирован (Юрова и Володин, 2011) блок растительного покрова LPJ-DGVM (Sitch et al., 2003).

Взаимодействие атмосферы с водоемами суши. Наиболее полно термогидродинамика водоемов и их взаимодействие с атмосферой могут быть воспроизведены в рамках трехмерных численных моделей. Например, для Великих Американских озер разработана система оперативного прогноза волнения, температуры и других параметров состояния водоема, причем в качестве граничных условий используются данные расчетов по мезомасштабной модели (Kelley et al., 1998). При очевидных достоинствах трехмерных моделей, область их применения ограничивается двумя важными с практической точки зрения обстоятельствами: во-первых, они являются затратными в вычислительном отношении и, во-вторых, они требуют подробной информации о моделируемом объекте. В частности, необходимо знание распределения глубин в озере, а в задаче краткосрочного прогноза состояния озера требуется иметь также данные измерений начального состояния. В то же время, для подавляющего количества озер на земной поверхности неизвестна даже их средняя глубина. Ввиду указанных причин в рамках большинства задач взаимодействия атмосферы с водными объектами используются одномерные модели, отражающие основные закономерности теплообмена в водоеме в вертикальном направлении.

В основу такого описания (Степаненко и Лыкосов, 2005, Степаненко, 2005) термодинамического режима водоема положено одномерное уравнение теплопроводности. Предполагается, что начало направленной вниз вертикальной координаты z совмещено с уровнем свободной поверхности, так что область, в которой ищется решение, представляет собой отрезок $[0, h]$, где $h = h(t)$ – глубина водоема (толщина слоя воды), а t – время. Удобно перейти от исходной вертикальной координаты z к новой вертикальной координате $\xi = z/h$. В переменных (ξ, t) уравнение теплопроводности принимает вид:

$$C_w \rho_w \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{h^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + C_w \rho_w \frac{dh}{dt} \frac{\xi}{h} \frac{\partial T}{\partial \xi} - C_w \rho_w \frac{1}{h} B_w \frac{\partial T}{\partial \xi} - \frac{1}{h} \frac{\partial S}{\partial \xi}. \quad (2.3.15)$$

Здесь T – температура, λ – коэффициент теплопроводности, $B_w = r - E$ – скорость приращения слоя воды на верхней границе (водный баланс на поверхности водоема), r – интенсивность осадков, E – скорость испарения с поверхности водоема, S – поток солнечной радиации в толще водоема. Для расчета потока солнечной радиации применяется широко используемая в различных исследованиях экспоненциальная зависимость

$$S(\xi) = (1 - \beta_e) S(0) \exp(-\alpha_e h \xi), \quad (2.3.16)$$

где α_e – коэффициент экстинкции, обычно принимающий значения от 0.5 до 1 м⁻¹, а β_e – доля (0.4 – 0.5) инфракрасной части в спектре солнечной радиации, которая поглощается поверхностью водоема (Deas and Lowney, 2000).

Турбулентный теплообмен является основным механизмом вертикального обмена тепла и массой в водоеме. В рамках так называемой « E - ε » параметризации коэффициент турбулентной теплопроводности λ определяется следующим образом:

$$\lambda = C_w \rho_w \text{Pr}^{-1} k, \quad (2.3.17)$$

где $Pr = k_T / k$ есть турбулентное число Прандтля, а коэффициент турбулентности k вычисляется по формуле:

$$k = C_e \frac{E^2}{\varepsilon}. \quad (2.3.18)$$

Величина кинетической энергии турбулентности E рассчитывается с помощью уравнения

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{h^2} \frac{\partial}{\partial \xi} k \frac{\partial E}{\partial \xi} + \frac{\xi}{h} \frac{dh}{dt} \frac{\partial E}{\partial \xi} + G - \varepsilon. \quad (2.3.19)$$

Здесь $C_e = 0.09$, слагаемое G представляет собой суммарное производство кинетической энергии турбулентности за счет сдвига скорости и за счет эффекта плотностной стратификации:

$$G = \frac{k}{h^2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} \right)^2 \right] - Pr^{-1} \frac{g}{\rho_w} \frac{k}{h} \frac{\partial \rho_w}{\partial \xi}, \quad (2.3.20)$$

а скорость ее диссипации можно найти из уравнения (Лыкосов, 1992):

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\alpha_\varepsilon}{h^2} \frac{\partial}{\partial \xi} k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \xi} + \frac{\xi}{h} \frac{dh}{dt} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \xi} + C_1 \frac{\varepsilon}{E} (G - \varepsilon), \quad (2.3.21)$$

где $\alpha_\varepsilon = 1/\sigma_\varepsilon$ ($\sigma_\varepsilon = 1.3$ - безразмерная константа), C_1 - функция аналога числа Рейнольдса Re :

$$C_1 = \frac{C_0}{1 + 0.69(2 - C_0)/\sqrt{Re}}, \quad Re = \frac{(2E/3)^2}{\nu \varepsilon}. \quad (2.3.22)$$

Здесь $\nu = 1.007 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ - молекулярная вязкость воды, безразмерная константа C_0 принята равной 1.9. Следует заметить, что во многих моделях океанических и атмосферных пограничных слоев последнее слагаемое в уравнении (2.3.21) записывается в виде

$$\frac{\varepsilon}{E} (C_1 G - C_2 \varepsilon), \quad (2.3.23)$$

где C_1 и C_2 - различные константы. Это приводит к нарушению естественного условия баланса между производством и диссипацией кинетической энергии турбулентности $G = \varepsilon$, которое должно иметь место при стационарной и однородной по пространству турбулентности. В этих условиях из (2.3.22) следует, что $G = C_2 \varepsilon / C_1$, то есть $G \neq \varepsilon$.

Для вычисления зональной u и меридиональной v компонент скорости течения используются уравнения Экмана, в которых учтен турбулентный перенос импульса и отклоняющая сила вращения Земли:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{1}{h^2} \frac{\partial}{\partial \xi} k \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\xi}{h} \frac{dh}{dt} \frac{\partial u}{\partial \xi} - fv, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{1}{h^2} \frac{\partial}{\partial \xi} k \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\xi}{h} \frac{dh}{dt} \frac{\partial v}{\partial \xi} + fu,\end{aligned}\quad (2.3.24)$$

где f – параметр Кориолиса. При этом формулируются следующие граничные условия: на свободной поверхности $\xi = 0$ (граница водоем-атмосфера) поток импульса считается непрерывным:

$$-\rho k h^{-1} \left. \frac{\partial u}{\partial \xi} \right|_0 = \tau_x, \quad -\rho k h^{-1} \left. \frac{\partial v}{\partial \xi} \right|_0 = \tau_y, \quad (2.3.25)$$

где в правых частях записаны, соответственно, зональная и меридиональная составляющие напряжения трения, рассчитываемые с помощью параметризации турбулентных потоков в приземном слое атмосферы. Аналогичные граничные условия используются и на границах раздела Γ водной среды с твердой поверхностью (вода-лед, вода-грунт), причем потоки импульса задаются в этом случае по формулам Шези (Чеботарев, 1975):

$$\tau_x|_{\Gamma} = \pm \rho g C_z^{-2} u \sqrt{u^2 + v^2}, \quad \tau_y|_{\Gamma} = \pm \rho g C_z^{-2} v \sqrt{u^2 + v^2}, \quad (2.3.26)$$

где C_z – коэффициент Шези, определяемый шероховатостью поверхности. В этих формулах знак “+” используется в случае (нижней) поверхности вода-грунт, а “–” в случае (верхней) поверхности вода-лед.

В модели рассчитывается изменение толщины слоя льда во времени и распространение тепла в нем согласно уравнению, аналогичному (2.3.15), но с молекулярным коэффициентом температуропроводности. В случае, если лед покрыт снегом, то аналогично изложенному выше вычисляются толщина снежного покрова, температура, плотность и содержание жидкой влаги. Температура, влажность и содержание льда в грунте под водоемом описываются системой уравнений тепловлагопереноса с учетом фазовых переходов влаги (2.3.1). При этом, поскольку под телом водоема грунт должен быть насыщенным жидкой (при промерзании – твердой) влагой, то содержанием водяного пара, а также влажностью грунта за счет градиента температуры, можно пренебречь.

Для расчета температуры верхней границы воды, льда или снежного покрова используется уравнение теплового баланса (2.3.11). В переходные сезоны, когда на незамерзший водоем могут выпадать осадки в твердом виде или случается дождь в период ледостава, в это уравнение добавляются слагаемые, учитывающие энергетический вклад данных процессов. Для определения глубины водоема h записывается уравнение водного баланса водоёма:

$$\frac{dh}{dt} = P - E_s - R_s - R_b, \quad (2.3.27)$$

где R_s – поверхностный сток, R_b – водообмен тела водоема с нижележащим грунтом.

Рассмотренная выше одномерная модель гидротермодинамики водоема дополнена блоком генерации, переноса и стока метана в талике (талая часть грунта под водоемом) и толще водоема (Степаненко и др., 2011). С этой целью предложена параметризация генерации метана в ходе разложения органики, попадающей в область положительной

температуры при заглублении талика. В модели также рассчитываются диффузионный и пузырьковый перенос метана в вышележащие слои грунта и водную толщу, окисление метана в водной среде с образованием углекислого газа.

2.4. Химия атмосферы и радиационные процессы

Присутствующий в правой части термодинамического уравнения (1.3.9) суммарный приток тепла $\rho c_p Q$ включает, в частности, составляющую ε_r , обусловленную излучением и поглощением радиации. Эта составляющая может быть представлена следующим образом:

$$\varepsilon_r = \varepsilon_{lw} + \varepsilon_{sw}, \quad (2.4.1)$$

где ε_{lw} и ε_{sw} отвечают за вклад тепловой и солнечной радиации, соответственно. Радиационные источники тепла формируются в результате взаимодействия теплового и солнечного излучения с подстилающей поверхностью, облаками, атмосферными газами, аэрозолем. Для определения притоков тепла к атмосферным слоям и радиационных потоков на подстилающей поверхности, т.е. радиационных характеристик, входящих в правые части уравнений притока тепла и теплового баланса, требуется модель облачной атмосферы. Это относится как к количеству облаков в ячейке интегрирования, под которым обычно понимается доля горизонтального покрытия неба облаками (балл облаков), так и к взаимному вертикальному расположению облачных слоев относительно друг друга (вертикальное перекрывание облаков). Необходимо выбрать алгоритмы разделения облаков на капельные и кристаллические, задаться радиусами капель и размерами кристаллов, найти способы расчета водности и ледности облачных образований, их оптических характеристик. Эта весьма важная часть модели существенно влияет на вычислительные затраты при проведении численных экспериментов.

Облака в атмосферных моделях связаны с конвективными и с крупномасштабными процессами. Следуя работе (Slingo, 1987), количество конвективных облаков обычно определяется в зависимости от величины конвективных осадков. Высотные границы расположения конвективных облаков определяются областью конвективной активности. Широтная зона действия этого механизма расположена в основном в пределах тропической области тропосферы, но определяет в ней основную массу облаков. Выше 400 гПа располагается верхний ярус облаков, ниже 700 гПа – нижний ярус, между ними – средний. Следует подчеркнуть, что схема параметризации облачности в атмосферных моделях построена на основе сопоставления данных моделирования и различных характеристик реальной атмосферы на предмет их близости, а не на основе анализа собственно реальных облаков. Поэтому в каждой отдельно взятой модели облачная схема содержит ряд подгоночных параметров. Надо сказать, что влияние этих параметров на результаты моделирования достаточно велико и выбор необходимых их значений требует большой исследовательской работы. В частности, анализ результатов различных модельных групп из программы СМIP показал, что чувствительность моделей к удвоению концентрации углекислого газа в атмосфере сильно зависит от схемы параметризации облачности в пограничном слое (Дымников и др., 2004).

Газовые примеси и их химические преобразования. Из поглощающих газовых компонент атмосферы в модели включают водяной пар H_2O , углекислый газ CO_2 , озон O_3 , кислород O_2 , метан CH_4 , закись азота N_2O . На ранних этапах развития климатических моделей только водяной пар являлся элементом динамического моделирования; остальные же газовые компоненты и аэрозоль присутствовали, главным образом, в качестве фоновых распределений. В то же время, тенденция развития климатических

моделей такова, что и для расчета остальных радиационно-активных компонент все чаще привлекаются прогностические уравнения (Галин и др., 2007).

Различные источники на поверхности Земли выбрасывают в атмосферу газоподобные вещества природного и антропогенного происхождения, которые вследствие химической трансформации могут приводить к появлению новых химических веществ, не присутствовавших в исходных выбросах. В атмосферных химических процессах важное значение имеют такие вещества, как углеводороды HC, окись углерода CO, метан CH₄, оксиды азота NO_x, двуокись серы SO₂ и др. В частности, выбросы двуокиси серы и последующее ее окислением ведут к образованию серной кислоты и выпадению кислотных осадков.

Образование тропосферного озона происходит при солнечном свете в условиях, когда в воздухе имеются оксиды азота и углеводороды. Солнечная радиация обеспечивает необходимой энергией ультрафиолетовое излучение, приводящее к образованию так называемых свободных радикалов. В присутствии оксидов азота эти свободные радикалы служат катализаторами процесса окисления углеводородов до двуокиси углерода, побочным продуктом которого является озон. Кроме того, озон является самокатализатором в процессе фотодиссоциации и образования свободных радикалов. В свою очередь, оксиды азота выбрасываются в атмосферу, в основном, как результат сжигания топлива в виде NO, который окисляется до NO₂ в ходе реакции с озоном.

Уравнение переноса *N*-компонентной трансформируемой примеси можно записать в следующем виде (Алоян, 2008):

$$\frac{dC_n}{dt} - w_{gn} \frac{\partial C_n}{\partial z} = F_{C_n} + B(\bar{x}, C_1, \dots, C_N) C_n, \quad (2.4.2)$$

где C_n , w_{gn} и F_{C_n} ($n=1, \dots, N$) – концентрация, скорость гравитационного оседания и турбулентная диффузия *n*-го компонента, а матричный оператор $B(\bar{x}, C_1, \dots, C_N)$ определяет скорости изменения концентраций примесей вследствие процессов химической трансформации. Если время жизни τ_n соответствующей субстанции существенно меньше наименьшего характерного времени процесса, явно воспроизводимого моделью, то систему уравнений (2.4.2) можно рассматривать как фотохимически равновесную и стационарные концентрации этих веществ находить из решения системы, в общем случае, нелинейных алгебраических уравнений. В противном случае, эволюция субстанций во времени должна определяться путем решения нестационарной системы нелинейных дифференциальных уравнений.

Количество реакций в реальных атмосферных условиях достигает нескольких сотен, причем константы скоростей реакции различаются между собой на десятки порядков. По этому признаку систему уравнений (2.4.2) можно отнести к жестким системам. Опуская (для удобства записи) адвективные и диффузионные слагаемые, эту систему можно конкретизировать следующим образом:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = - \sum_{n=1}^N \alpha_{kn} C_n + \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \beta_{kmn} C_m C_n, \quad k=1, \dots, N, \quad (2.4.3)$$

где α_{kn} и β_{kmn} – константы скоростей реакций с участием C_k , соответствующих расходу и производству данного вещества.

При решении систем вида (2.4.3) весьма эффективными оказались алгоритмы с переменным шагом и переменным порядком, в частности, – метод Гира (Gear, 1971), который принадлежит классу неявных методов и базируется на формулах дифференцирования назад. Этот алгоритм позволяет оптимизировать поиск решения с

помощью автоматического выбора поправки величины шага по времени и позволяет оценивать ошибку численного решения на каждом временном шаге. Для интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2.4.3) можно также использовать явный метод Рунге-Кутты-Чебышева с переменными шагами по времени, основанный на свойствах многочленов типа чебышевских (Лебедев, 1991). В зависимости от вида спектра матрицы Якоби правой этой системы уравнений, порядка локальной аппроксимации метода и гладкости решения данный алгоритм генерирует серию временных шагов.

Тепловое излучение. Радиационные процессы в современных моделях описываются на основе многоспектральных представлений. Например, в описываемом ниже в качестве примера радиационном блоке климатической модели ИВМ РАН (Галин, 1998, Алексеев и др., 1998) коротковолновая часть спектра представлена 18 спектральными интервалами, а длинноволновая (тепловая) часть – 10 интервалами. Для расчета нисходящих и восходящих потоков теплового излучения в модельной атмосфере используются следующие формулы:

$$\begin{aligned} F_{\Delta\nu}^{\downarrow}(p) &= -\int_0^p B_{\Delta\nu}[T(p')] \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(p, p')}{\partial p'} dp', \\ F_{\Delta\nu}^{\uparrow}(p) &= B_{gr} \tau_{\Delta\nu}(p, p_s) + \int_p^{p_s} B_{\Delta\nu}[T(p')] \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(p, p')}{\partial p'} dp', \\ B_{gr} &= \delta_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_s) + (1 - \delta_{\Delta\nu}) F_{\Delta\nu}^{\downarrow}(p_s), \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

где p и p_s – давление в атмосфере и на подстилающей поверхности, T_s и $\delta_{\Delta\nu}$ – температура и излучательная способность этой поверхности, $B_{\Delta\nu}(T)$ – функция Планка, проинтегрированная по спектральному участку $\Delta\nu$, B_{gr} – излучение подстилающей поверхности, $\tau_{\Delta\nu}(p, p')$ – функция пропускания диффузного излучения между уровнями p и p_s . Вся длинноволновая часть спектра разбита на определенное (например, 10) число интервалов $\Delta\nu$ (Chou et al., 1993). Функции пропускания водяного пара, углекислого газа, а также континуальное поглощение водяным паром, представлены в виде так называемых k -распределений:

$$\tau(w) = \sum_{i=1}^6 c_i \exp(-1.66 k_i w), \quad (2.4.5)$$

где w – эффективная масса поглощающего вещества в слое (p, p') , определенная с учетом профилей температуры и давления в этом слое. Таблицы коэффициентов c_i и k_i приведены в работе (Chou et al., 1993). Функция пропускания озона в полосе 9.6 мкм трудно поддается подобному разложению. Поэтому для озона используются таблицы двухпараметрического представления типа Куртиса-Годсона, приведенные в работе (Chou and Kouvaris, 1991). Функции пропускания метана CH_4 и закиси азота N_2O приведены в работе (Chou et al., 1991):

$$\tau(w) = \exp\left(-\frac{aw}{1+bw^n}\right) \quad (2.4.6)$$

вместе с таблицами коэффициентов a , b и n .

Пусть на p -поверхностях модельных данных заданы массовые доли q_i всех поглощающих газовых компонент и температура T . Тогда эффективная масса w_i любой компоненты в слое Δp определяется как

$$w_i = \frac{1}{g_{\Delta p}} \int q_i \left(\frac{p}{p_r} \right)^m f(T, T_r) dp, \quad (2.4.7)$$

где T_r и p_r – некоторые реперные значения температуры и давления, для которых определены функции пропускания. Функция $f(T, T_r)$ имеет вид (Chou et al., 1993):

$$f(T, T_r) = 1 + a(T - T_r) + b(T - T_r)^2. \quad (2.4.8)$$

Таблицы значений коэффициентов a , b и m , а также значений p_r и T_r , приведены в (Chou et al., 1993) для всех 10 спектральных интервалов.

Для расчета потоков теплового излучения в облачной атмосфере применяется так называемое "черное приближение" (Фейгельсон, 1981), т.е. облака предполагаются абсолютно черными излучателями. Для аэрозольной компоненты атмосферы можно использовать результаты работы (Креков и Рахимов, 1986). Аэрозоль в климатических моделях часто учитывается в виде фоновой составляющей и потому можно воспользоваться заранее подготовленными зональными таблицами оптических толщин, характерных для суши, океанов, тропосферы и стратосферы, и функцией пропускания (также экспоненциального вида). Вместе с тем, развитие климатических моделей требует включение в рассмотрение процессов генерации, переноса, трансформации и осаждения аэрозоля.

Эффективные массы поглощающих компонент атмосферы должны быть рассчитаны для каждого из спектральных интервалов, поскольку любой из них имеет индивидуальный характер зависимости от температуры и давления. Учет перекрывания полос поглощения различных субстанций в пределах отдельного спектрального участка производится простым перемножением индивидуальных функций пропускания. По утверждению авторов работы (Chou et al., 1993), относительно небольшая ширина участков $\Delta \nu$ допускает такое приближение.

Для расчета потоков нисходящего и восходящего излучений можно использовать приведенные ниже аппроксимационные формулы (Фейгельсон, 1981), в которых для простоты записи индексы $\Delta \nu$ опущены:

$$\begin{aligned} F_n^\downarrow &= - \sum_{m=1}^{n-1} B_m^* (\tau_{n,m} - \tau_{n,m+1}), \quad (n = 2, \dots, N), \\ F_n^\uparrow &= B_{gr} \tau_{n,N} + \sum_{m=n}^{N-1} B_m^* (\tau_{n,m} - \tau_{n,m+1}), \quad (n = 1, \dots, N-1), \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

где $F_n^\downarrow$ и $F_n^\uparrow$ – радиационные потоки на уровне n , $\tau_{n,m}$ – функция пропускания всех компонент атмосферы в рассматриваемом спектральном участке между уровнями n и m , N – число слоев, B_m^* – некоторая средняя величина функции Планка в слое. Легко видеть, что поток излучения на каждом уровне n складывается из суммы излучений всех слоев выше (для нисходящего потока) и ниже (для восходящего потока) с весом $(\tau_{n,m} - \tau_{n,m+1})$. Величина B_m^* принята зависящей линейно от разности $(\tau_{n,m} - \tau_{n,m+1})$. Если слой оптически

тонкий, то B_m^* соответствует температуре середины слоя с номером m . Если же слой плотный, то в зависимости от степени плотности B_m^* приближается к значению при температуре соответствующей границы слоя.

Следует отметить одну важную особенность расчета радиационных процессов в моделях с неполным представлением атмосферы по высоте (например, рассматриваются только тропосфера и стратосфера). Чтобы избавиться от вычислительных неприятностей, связанных с заданием нулевых граничных условий для $F_n^\downarrow$ на верхней границе расчетной области модели, а также для учета массы озона выше этой границы, в радиационном блоке часто вводят дополнительный слой, в котором содержание озона и других газовых составляющих задается в виде некоторых фиксированных «климатических» распределений. Хотя притоки тепла дополнительного слоя при этом в модели не используются, но в первом приближении учитывается влияние расположенной выше верхней атмосферы. Этот слой действует как в тепловой области спектра, так и в солнечной. В ходе дальнейшего развития климатических моделей необходимо перейти к явному описанию процессов в верхней атмосфере.

В результате последовательного использования описанной методики можно рассчитать потоки нисходящего и восходящего излучений в каждом из спектральных участков тепловой области. Суммированием по всем 10 участкам затем вычисляются требуемые потоки $F_n^\downarrow$ и $F_n^\uparrow$ для всего теплового диапазона, что позволяет рассчитать полные (эффективные) потоки $\Delta F = F^\uparrow - F^\downarrow$, а затем и притоки длинноволновой радиации к слоям

$$\varepsilon_{lw} = \frac{g}{c_p} \frac{\Delta F}{\Delta p}. \quad (2.4.10)$$

Вместе с функцией ε_{lw} рассчитывается также величина нисходящего потока излучения на подстилающей поверхности $F_g = F^\downarrow(p_s)$.

Солнечное нагревание. Для расчета потоков радиации в солнечном спектре целесообразно использовать приближенные схемы учета эффектов рассеяния и поглощения в атмосфере на основе δ -метода Эдингтона (Joseph et al., 1976). Поглощающие компоненты в атмосфере представлены H_2O , CO_2 , O_3 , O_2 , аэрозолем и облаками. В модель должны быть включены рэлеевское и аэрозольное рассеяние, рассеяние в облаках и отражение от подстилающей поверхности. Следуя результатам работы (Slingo, 1989), солнечный спектр можно разбить на 4 интервала. Предполагается, что в каждом из интервалов известны вертикальные распределения оптических толщин атмосферных слоев (τ) для рэлеевского рассеяния и аэрозольного ослабления.

Для учета селективного поглощения газовых компонент атмосферы H_2O , CO_2 , O_3 и O_2 следует ввести дополнительное разбиение каждого из интервалов на частичные поддиапазоны в зависимости от поглощающих свойств рассматриваемых газов. В работе (Briegleb, 1992) приведены такие поддиапазоны вместе с коэффициентами поглощения атмосферных газов, методом вычисления эффективных масс и оптических толщин в каждом из них. В итоге общее число интервалов в солнечном спектре выросло до 18. Из них 8 первых полностью охватывают область поглощения O_3 в ультрафиолетовом и видимом диапазонах спектра 0.2 – 0.7 мкм. Последние три интервала относятся к слабому поглощению углекислого газа. Водяной пар представлен остальными 7 интервалами, для которых коэффициенты поглощения получены из представления функции пропускания в виде k -распределений. Следует отметить, что необходимость такого способа учета поглощения газовых компонент увеличивает время расчета притоков. Альтернативным

методом учета селективного поглощения является метод распределения фотонов по пробегам (Фейгельсон, 1981), который не требует дополнительного разбиения спектра и успешно используется в ряде современных климатических моделей (Phillips, 1994).

Используемые в описываемой радиационной модели характеристики аэрозоля представлены в виде заранее подготовленных таблиц аэрозольных оптических толщин (τ) модельных слоев в 4-х спектральных интервалах, рассчитанных на базе работы (Креков и Рахимов, 1986). Задаются также альбеда однократного рассеяния аэрозоля (вероятность выживания фотонов ω) в тех же спектральных интервалах и слоях, что и τ , параметр асимметрии индикатрисы рассеяния аэрозоля (γ). В солнечном спектре аэрозольное взаимодействие рассчитывается по совокупности указанных параметров τ , ω , γ . В тепловом диапазоне также имеется возможность учета влияния аэрозоля, но его эффект сравнительно мал.

Система линейных дифференциальных уравнений для потоков нисходящей D и восходящей U радиации в отдельном спектральном интервале имеет вид (King and Harshvardhan, 1986):

$$\begin{aligned}\frac{dD}{d\tau} &= \alpha_2 U - \alpha_1 D + \pi S_0 \omega (1 - \alpha_3) e^{-\tau/\mu_0}, \\ \frac{dU}{d\tau} &= \alpha_1 U - \alpha_2 D - \pi S_0 \omega \alpha_3 e^{-\tau/\mu_0}\end{aligned}\quad (2.4.11)$$

с граничными условиями, записанными при $\tau = 0$ (верхняя граница атмосферы) и $\tau = \tau_s$ (подстилающая поверхность), соответственно:

$$D(0) = 0, \quad U(\tau_s) = A_{dif} D(\tau_s) + A_{dir} \pi S_0 \mu_0 e^{-\tau_s/\mu_0}. \quad (2.4.12)$$

Здесь A_{dif} и A_{dir} – альбеда подстилающей поверхности для диффузного и прямого излучений, S_0 – интенсивность солнечной радиации в рассматриваемом интервале, μ_0 – косинус зенитного угла Солнца, τ_s – полная оптическая толщина атмосферы с учетом всех компонент ослабления, свойственных для данного спектрального интервала, а $\tau(p)$ – оптическая толщина атмосферы, рассчитываемая от верхней границы атмосферы до данного p -уровня. Решение задачи зависит от представлений коэффициентов α_1 , α_2 , α_3 как функций от τ , ω , γ и μ_0 , однако, ни одно из них не дает универсально точные результаты для всех возможных ситуаций в атмосфере (Никонов, 1995). В ряде климатических моделей используется δ -метод Эдингтона со следующим выбором коэффициентов:

$$\alpha_1 = \frac{1}{4} [7 - \omega(4 + 3\gamma)], \quad \alpha_2 = -\frac{1}{4} [1 - \omega(4 - 3\gamma)], \quad \alpha_3 = \frac{1}{4} (2 - 3\mu\mu_0). \quad (2.4.13)$$

В результате (численного или аналитического) решения системы (2.4.9) – (2.4.10) находятся направленные потоки U и D , а затем вычисляются полные потоки $S = U - D$ и притоки тепла к отдельным слоям

$$\varepsilon_{sw} = \frac{g}{c_p} \frac{\Delta S}{\Delta p}. \quad (2.4.14)$$

Вместе с функцией ε_{sw} рассчитывается также величина полного потока солнечного излучения на подстилающей поверхности

$$S_g = D(\tau_s) - U(\tau_s). \quad (2.4.15)$$

Для контроля точности численного (Самарский и Николаев, 1978) решения системы (2.4.9) автором радиационного блока климатической модели ИВМ РАН В.Я. Галиным проведено сравнение с иным способом решения этой системы, который является почти полностью аналитическим (Coakley et al., 1983). При этом подходе задача решается аналитически для каждого слоя дважды: для прямого и диффузного излучений. Затем, используя метод сложения, вычисляются потоки для комбинаций слоев. Такой подход применяется во многих зарубежных моделях (Phillips, 1994). Расчеты показали, что в безоблачной атмосфере результаты численного и аналитического интегрирования идентичны, а в облачной атмосфере точность численного метода выше.

Параметризация облачности. При расчете радиационных потоков требуются данные об облачности. Полное количество облаков A (в долях единицы) каждого модельного слоя определяется комбинацией крупномасштабных A_{ls} и конвективных облаков A_c :

$$A = (1 - A_c) A_{ls} + A_c. \quad (2.4.16)$$

Методы расчета крупномасштабной и конвективной облачности изложены в следующем разделе 2.5. В ряде атмосферных моделей прогностической величиной является также и водность облаков q_l . Упрощенный (реализованный, в частности, в модели ИВМ РАН) способ диагностической оценки водности облаков основан на использовании формулы Мазина для зависимости водности от температуры (Мазин, 1994), которая была несколько уточнена в работе (Lemus et al., 1997):

$$q_l = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3, \quad (2.4.17)$$

где T – температура в градусах Цельсия, $a_0 = 0.12669$, $a_1 = 6.7773 \cdot 10^{-3} (^{\circ}\text{C})^{-1}$, $a_2 = 1.2937 \cdot 10^{-4} (^{\circ}\text{C})^{-2}$, $a_3 = 8.6684 \cdot 10^{-7} (^{\circ}\text{C})^{-3}$. Если температура положительна, то q_l рассчитывается для нулевой температуры, а если ниже -50°C , то для этой температуры. Для разделения водности по фазовому составу на кристаллическую и капельную части можно использовать эмпирическую формулу Матвеева (1981) при той же температуре T :

$$f_l(T) = 0.0059 + 0.9941 e^{-bT^2}, \quad (2.4.18)$$

где $b = 0.003102 (^{\circ}\text{C})^{-2}$, f_l – доля жидкокапельной части, а $1 - f_l$ – кристаллической. Согласно этой формуле, незамерзающие капли жидкости в облаках могут существовать при весьма низких температурах. Эффективный радиус жидких капель можно принять равным 10 мкм, кристаллов льда – 30 мкм. Водозапас каждого слоя рассчитывается умножением водности этого слоя q_l на характерные толщины d_c облаков соответствующего яруса (Фейгельсон, 1981). Эта толщина в моделях обычно подгоняется так, чтобы обеспечить наблюдаемое в реальности альbedo облаков. Водозапас слоя в облаке для жидкой W_l и кристаллической W_i частей может быть рассчитан, таким образом, по следующим формулам (Матвеев, 1981):

$$W_l = q_l f_l d_c, \quad W_i = q_l (1 - f_l) d_c. \quad (2.4.19)$$

Такое разделение водозапаса облаков необходимо для вычисления оптических толщин слоев для жидкой и кристаллической частей отдельно, которые существенно различаются между собой. В модели ИВМ РАН величина d_c принята равной геометрической толщине модельного слоя.

Предполагается (Галин, 1998), что перекрывание облаков различных ярусов по вертикали можно описать с помощью гипотез случайного $p^{(r)}$ и максимального $p^{(m)}$ перекрываний. Так, вероятность $p_{z_1 z_2}$ пробега фотонов без столкновения с облаками между z_1 (модельный уровень k_1) и z_2 (модельный уровень k_2) определяется соотношениями:

$$p_{z_1 z_2} = \lambda p_{z_1 z_2}^{(m)} + (1 - \lambda) p_{z_1 z_2}^{(r)}, \quad (2.4.20)$$

где

$$p_{z_1 z_2}^{(r)} = \prod_{k=k_1}^{k_2-1} (1 - A_k), \quad p_{z_1 z_2}^{(m)} = 1 - \max_{k_1 \leq k \leq k_2-1} A_k \quad (2.4.21)$$

и эмпирический параметр λ указывает на преобладание той или иной гипотезы. В тропических широтах параметр λ можно задать близким к 1, принимая преобладание максимального перекрывания облаков, а в высоких широтах - ближе к нулю, считая, что преобладает случайное перекрывание.

В длинноволновой части солнечного спектра применение любой гипотезы перекрывания не представляет трудностей. Для каждого модельного слоя вычисляются необходимые оптические толщины и излучательная способность облаков с учетом диффузности излучения. Далее, при вычислении потоков излучения в полном объеме, как изложено выше, учитывается перекрывание облаков. Для коротковолновой части спектра, где важно учитывать как поглощение, так и рассеяние облаков, полное соблюдение произвольной гипотезы перекрывания затруднительно и трудоемко, если только в расчетах не используется метод Монте Карло. В модели ИВМ РАН каждый вертикальный столб атмосферы от подстилающей поверхности до ее верхней границы разбивается на 8 частей с различными облаками. В каждой части атмосферного столба облака или полностью заполняют модельный слой или полностью отсутствуют. Расчеты потоков коротковолновой радиации проводятся для каждой из 8 частей отдельно, но уже без необходимости слежения за неоднородностью модельного слоя по горизонтали. Это несколько увеличивает время моделирования, но приводит к существенному улучшению его результатов.

2.5. Облачность и конвекция

Присутствующий в правой части термодинамического уравнения (1.3.9) суммарный приток тепла $c_p \rho Q$ включает также составляющую ε_f , обусловленную фазовыми переходами влаги и формированием облачности. Особую роль при этом играет ее микрофизика, под которой понимаются процессы, протекающие на масштабах облачных капель и других частиц (так называемых гидрометеоров). В микрофизике облаков обычно рассматривают частицы следующих типов (Warner, 2011): облачные жидкие капли типичного радиуса 10 мкм, которые образуются в результате конденсации водяного пара; капли дождя радиусом от 100 до 1000 мкм, образующиеся в результате

таяния снега или аккреции (увеличения) облачных частиц; ледяные кристаллы, формирующиеся в процессе замерзания жидкой влаги; агрегированные кристаллы льда и снежинки, представляющие собой кластеры, образующиеся в условиях, когда кристаллы с различной скоростью гравитационного оседания сталкиваются и объединяются; ледяные кристаллы, сталкивающиеся и слипающиеся с облачными каплями при температуре ниже точки замерзания; элементы снежной крупы, образующиеся в результате непрерывного замерзания капель дождя; градины, формирующиеся в переохлажденном облаке за счет замерзания отдельных капель и намерзания сталкивающихся с ними переохлажденных капель. Во внимание должны быть приняты следующие процессы фазовых переходов влаги: водяной пар $\rightarrow$ вода (конденсация), вода $\rightarrow$ пар (испарение), вода $\rightarrow$ лед (замерзание), лед $\rightarrow$ вода (таяние), пар $\rightarrow$ лед (осаждение), лед $\rightarrow$ пар (возгонка).

От качества моделирования (или параметризации) микрофизических процессов зависит тип рассчитываемых в атмосферной модели осадков, их количество и пространственное распределение. Это, в свою очередь, определяет точность расчета радиационных процессов, а значит, и воспроизведение атмосферных характеристик. В частности, при анализе отклика климатической системы на антропогенное воздействие используются понятия "динамический" отклик и отклик "радиационный". Показано (Володин и Дианский, 2003), что в суммарном отклике системы на изменение концентрации углекислого газа CO_2 главную роль играет радиационный отклик. Это проявляется в том, что чувствительность климатической модели к увеличению содержания атмосферного CO_2 определяется, в первую очередь, количеством тепла, расходуемым на прогрев океана, а также тем, насколько меняется радиационный баланс Земли в результате изменения облачности при изменении климата, то есть изменением радиационно-облачного воздействия (Watterson et al., 1999).

Слоистая облачность. В силу своей большой пространственной протяженности слоистая облачность может быть явно рассчитана в численных моделях прогноза погоды и климата, что, тем не менее, все равно предполагает параметризацию микрофизических процессов. В общем случае во внимание принимаются следующие формы состояния влаги и их концентрации: водяной пар q , облачная вода q_l , облачный лед q_i , снег q_s и дождь q_r . Для описания термодинамических процессов привлекаются уравнения следующего вида (см., например, Warner, 2011):

$$\begin{aligned}\frac{dq}{dt} &= F_q + S_3 + S_{12} + S_{13} - S_1 - S_2 - S_4, \\ \frac{dq_l}{dt} &= F_{q_l} + S_4 - S_5 - S_6 - S_7 - S_9, \\ \frac{dq_i}{dt} &= F_{q_i} + S_2 + S_5 - S_8 - S_{10} - S_{12}, \\ \frac{dq_s}{dt} - w_{gs} \frac{\partial q_s}{\partial z} &= F_{q_s} + S_1 + S_8 + S_9 + S_{10} - S_{11} - S_{13}, \\ \frac{dq_r}{dt} - w_{gr} \frac{\partial q_r}{\partial z} &= F_{q_r} + S_6 + S_7 + S_{11} - S_3,\end{aligned}\tag{2.5.1}$$

где слагаемые F_ψ ($\psi = q, q_l, q_i, q_s, q_r$) означают турбулентную диффузию соответствующих величин, w_{gs} и w_{gr} – скорость гравитационного оседания,

соответственно, для снега и дождя, а источники S_n ($n=1, \dots, 13$) отвечают за следующие процессы: S_1 и S_2 – осаждение водяного пара на частицах снега и кристаллах льда, соответственно; S_3 – испарение дождевых капель; S_4 – образование облачных капель за счет конденсации водяного пара; S_5 – образование льда вследствие замерзания облачной воды; S_6 – формирование дождя за счет роста облачных капель; S_7 – усиление дождя за счет «захвата» облачных капель; S_8 – рост кристаллов льда и формирование снегопада; S_9 – усиление снегопада за счет облачных капель; S_{10} – усиление снегопада за счет «захвата» кристаллов облачного льда; S_{11} – таяние снега и образование капель дождя, S_{12} и S_{13} – сублимация (возгонка) частиц снега и кристаллов льда. Расчет слагаемых S_n и соответствующих им притоков тепла проводится на основе параметризаций той или иной степени сложности, обзор которых можно найти в книгах (Алоян, 2008, Stensrud, 2007). Для иллюстрации же рассмотренного подхода целесообразно ограничиться наиболее простой схемой, изложенной, например, в работах (Матвеев, 1981, Дымников и др., 2005, Lykossov, 2001).

Пусть $q_w = q_l + q_i$ – общее влагосодержание жидкой и твердой фаз. Удобно воспользоваться следующей системой термодинамических уравнений, в которой оставлены (для простоты записи) лишь слагаемые, ответственные за фазовые переходы:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta}{\partial t} &= \varepsilon_f, \\ \frac{\partial q}{\partial t} &= E - C, \\ \frac{\partial q_w}{\partial t} &= -E + C,\end{aligned}\tag{2.5.2}$$

где C и E обозначают скорость фазовых переходов влаги водяной пар $\rightarrow$ жидкая влага (конденсация), вода и лед $\rightarrow$ пар (испарение и возгонка), соответственно. С достаточно хорошей точностью можно принять, что

$$\varepsilon_f = \frac{L_e}{c_p} (C - E).\tag{2.5.3}$$

Если теперь ввести «влажную» потенциальную температуру $\theta_w = \theta - (L_e / c_p) q_w$ и полное влагосодержание $q_t = q + q_w$, то уравнения (2.5.2) с учетом соотношения (2.5.3) можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial q_t}{\partial t} = 0.\tag{2.5.4}$$

При этом имеет место тождество

$$\theta + (L_e / c_p) q \equiv \theta_w + (L_e / c_p) q_t\tag{2.5.5}$$

Несмотря на то, что введение переменных θ_w и q_t избавляет от необходимости рассматривать фазовые переходы в явном виде, все же требуется алгоритм, позволяющий

на основе информации об этих величинах рассчитать температуру и все компоненты влаги. В безоблачном случае $q_w = 0$ и, следовательно,

$$\theta = \theta_w, \quad q = q_t.$$

В случае слоистой облачности в качестве критерия ее возникновения принимается условие $q \geq q_{\max}$, где $q_{\max}$ – удельная влажность насыщения, и предполагается, что в результате «мгновенной» конденсации удельная влажность принимает значения, равные значениям при насыщении. В результате возникает следующее трансцендентное уравнение относительно θ :

$$c_p \theta + L_e q_{\max}(\theta) = c_p \theta_w + L_e q_t, \quad (2.5.6)$$

решив которое (с помощью линеаризации или итерационным методом) при известной правой части, можно найти q и q_w из соотношений

$$q = q_{\max}(\theta), \quad q_w = q_t - q_{\max}(\theta). \quad (2.5.7)$$

Если оказывается, что $q_w > 0$, а $q < q_{\max}$, то предполагается, что часть жидкокапельной влаги (а при необходимости и полностью) испаряется, приводя тем самым к установлению новых значений q и q_w . Если же влажность воздуха q превышает насыщающее значение $q_{\max}(T, p)$, то предполагается, что весь избыток водяного пара конденсируется. Это позволяет вычислить как количество выпавших (крупномасштабных) осадков P_{ls} , так и изменения температуры δT и влажности δq :

$$P_{ls} = \int_{z_s}^{\infty} \delta q \rho dz, \quad \delta T = -\frac{L_e}{c_p} \delta q, \quad \delta q = \frac{q_{\max}(T, p) - q}{1 + \frac{L_e}{c_p} \frac{\partial q_{\max}(T, p)}{\partial T}}. \quad (2.5.8)$$

Ниже уровня конденсации можно также рассчитать испарение выпадающих осадков:

$$E = \gamma \frac{q_{\max}(T, p) - q}{1 + \frac{L_e}{c_p} \frac{\partial q_{\max}(T, p)}{\partial T}}, \quad (2.5.9)$$

где $\gamma < 1$ – некоторый числовой параметр. При этом количество выпавшей влаги уменьшается:

$$P_{ls} := P_{ls} - E \quad (2.5.10)$$

и изменяются температура и влажность воздуха:

$$T := T - \frac{L_e}{c_p} E, \quad q := q + E. \quad (2.5.11)$$

Для того, чтобы разделить q_w на две составляющие – удельную водность q_l и удельное содержание льда q_i , можно воспользоваться эмпирической зависимостью (Rockel et al., 1991), построенной в результате обработки данных самолетных измерений в облаках (Матвеев, 1981):

$$q_l = f_l q_w, \quad q_i = (1 - f_l) q_w, \quad (2.5.12)$$

где функция $f_l(T)$ задана формулой (2.4.18).

Количество крупномасштабных облаков A_{ls} в климатической модели ИВМ РАН рассчитывается следующим образом:

$$A_{ls} = \max \left(\frac{r - r_{cr}}{1 - r_{cr}}, 0 \right), \quad (2.5.13)$$

где r – относительная влажность, а r_{cr} – некоторое ее «критическое» значение. Наличие облаков допускается во всей тропосфере и считается, что они распределены по следующим ярусам: выше высоты поверхности 400 гПа – верхний, ниже 700 гПа – нижний и между этими высотами – средний ярус. Значения критической влажности r_{cr} фиксированы по ярусам сверху вниз равными 0.77, 0.75 и 0.87, соответственно. Для самых нижних уровней модели внутри пограничного слоя атмосферы максимально допустимые значения количества облаков дополнительно ограничиваются некоторыми предельными величинами. Соотношения, связывающие крупномасштабные облака с относительной влажностью, как правило, эффективно срабатывают в средних и высоких широтах. В тропической зоне вклад крупномасштабной облачности невелик.

Проблема параметризации процессов выделения тепла при конденсации в случае кучевой конвекции и нагревания атмосферы за счет этого тепла (особенно, в низких широтах) является одной из ключевых задач в моделировании динамики климатической системы. Можно выделить три основных подхода к решению этой проблемы. Первый из них (Manabe and Bryan, 1969) базируется на идее согласования полей метеорологических элементов исходя из некоторых энергетических принципов; второй метод основан на принципе условной неустойчивости второго рода (Kuo, 1974), а третий подход связан с описанием ансамбля кучевых облаков (Arakawa and Schubert, 1974).

Конвекция. В крупномасштабных атмосферных моделях реализовано несколько видов параметризации глубокой конвекции. В процедурах типа конвективного приспособления считается, что если в каком-то вертикальном столбе имеет место влажная неустойчивость, то в результате процесса конвекции профили температуры и влажности становятся либо влажноадиабатическими, либо имеют заранее заданный вид, несколько отличающийся от влажноадиабатического распределения. Известны также параметризации, в которых с некоторым характерным временем, составляющим как правило несколько часов, осуществляется приближение модельных профилей температуры и влажности к заданным (реперным) распределениям. К числу таких параметризаций относится схема (Betts, 1986).

В параметризации конвекции, предложенной в работе (Кую, 1974), полагается, что в случае влажной неустойчивости формируется конвективная облачность от верхней границы пограничного слоя до уровня нулевой плавучести. При этом конвективные притоки тепла в облачном слое зависят от конвергенции водяного пара и от некоторого параметра β (см. ниже), характеризующего перемешивание облачного воздуха с окружением.

Физически более полными являются схемы конвекции типа Аракавы-Шуберта (Arakawa and Schubert, 1974), а также модифицированный вариант этой схемы (Pan and Randall, 1988). В этих параметризациях считается, что существует ансамбль конвективных облаков с одинаковой нижней границей, совпадающей с высотой пограничного слоя, и с различной верхней границей. Каждое такое облако создает свой поток массы, вследствие которого происходят изменения температуры, влажности и импульса в рассматриваемой области. В схеме параметризации Тидтке (Tiedtke, 1989) также используется предположение о вертикальном потоке массы вследствие развития конвективной облачности, однако, эта схема не предусматривает спектрального представления облачного ансамбля, а учитывает лишь интегральные соотношения.

В настоящий момент нет однозначного мнения о том, какой тип параметризации конвекции является наилучшим при использовании в качестве блока атмосферной модели. Тем не менее, следует отметить, что схему Аракавы-Шуберта, несмотря на физическую полноту описания конвективного облачного ансамбля, труднее настроить на то, чтобы модель с использованием этой схемы воспроизводила реалистичный климат. Более того, модели, наиболее реалистично описывающие климатические параметры, связанные с конвекцией, чаще всего используют упрощенную схему Тидтке для расчета потока массы (см., например, Мелешко и др., 2001). Будущее, по-видимому, за моделями, в которых конвективные процессы описываются явно, что требует значительного увеличения пространственного разрешения и пересмотра существующих на данный момент параметризаций процессов подсеточных масштабов.

В модели Института вычислительной математики РАН используется схема конвективного приспособления (Betts, 1986). Кроме параметризации глубокой конвекции, в этой модели реализована также схема расчета мелкой конвекции и, кроме того, проводится конвективное согласование двух расположенных один под другим слоев. Все детали вычислительных процедур, связанных с алгоритмами, излагаемыми ниже в соответствии с материалами работы Дымникова и др. (2005), представлены в (Алексеев и др., 1998).

Конвективное согласование. Пусть кучевая облачность формируется в слое между двумя уровнями z_b (нижний) и z_t (верхний). Следуя работе (Arakawa, 1972), предполагается, что в облаке сохраняется статическая энергия

$$h = c_p T + \Phi + L_e q, \quad (2.5.14)$$

где L_e – удельная теплота испарения. Поскольку облачный воздух насыщен паром, то

$$h = h^* \equiv c_p T + \Phi + L_e q_{\max}. \quad (2.5.15)$$

Если предположить, что воздух в облако поступает только через его основание, можно записать необходимое условие его существования:

$$h(z_b) \geq h^*(z_t), \quad (2.5.16)$$

или

$$c_p T(z_b) + \Phi(z_b) + L_e q(z_b) \geq c_p T(z_t) + \Phi(z_t) + L_e q_{\max}(z_t). \quad (2.5.17)$$

Учитывая, что $\Phi = gz$, это соотношение можно привести к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{T(z_b) - T(z_t)}{z_b - z_t} &\geq \frac{g}{c_p} - \frac{L_e}{c_p} \frac{q(z_b) - q_{\max}(z_t)}{z_t - z_b} \equiv \\ &\equiv \frac{g}{c_p} - \frac{L_e}{c_p} \left[\frac{q_{\max}(z_b) - q_{\max}(z_t)}{z_t - z_b} + \frac{(1-r)q_{\max}(z_b)}{z_t - z_b} \right], \end{aligned} \quad (2.5.18)$$

где $r = q(z_b) / q_{\max}(z_b)$. Поскольку левая часть аппроксимирует $-\partial T / \partial z$, а выражение

$$\frac{g}{c_p} - \frac{L_e}{c_p} \frac{q_{\max}(z_b) - q_{\max}(z_t)}{z_t - z_b}$$

аппроксимирует влажноадиабатический градиент γ_{ma} , то условие возникновения влажной конвекции можно переписать в виде

$$-\frac{\partial T}{\partial z} \geq \gamma_{ma} + \frac{L_e}{c_p} \frac{(1-r)q_{\max}(z_b)}{z_t - z_b}. \quad (2.5.19)$$

Если ввести понятие критической относительной влажности r_{cr} из условия, что градиент температуры не может быть больше сухадиабатического ($\gamma_a = g / c_p$), то будет иметь место соотношение

$$\gamma_a = \gamma_{ma} + \frac{L_e}{c_p} \frac{(1-r_{cr})q_{\max}(z_b)}{z_t - z_b}$$

и, следовательно,

$$r_{cr} = 1 - \frac{c_p}{L_e q_{\max}(z_b)} (\gamma_a - \gamma_{ma})(z_t - z_b). \quad (2.5.20)$$

В результате, условие возникновения влажной конвекции можно записать следующим образом:

$$-\frac{\partial T}{\partial z} \geq \frac{1-r}{1-r_{cr}} \gamma_a + \frac{r-r_{cr}}{1-r_{cr}} \gamma_{ma} \equiv \gamma_{cr}. \quad (2.5.21)$$

Для описания состояния атмосферы после окончания конвекции можно воспользоваться следующими уравнениями, представляющими собой: 1) баланс полного влагосодержания:

$$\int_{z_b}^{z_t} \rho \tilde{q} dz = \int_{z_b}^{z_t} \rho q dz - P_c, \quad (2.5.22)$$

где волной сверху отмечены величины, полученные в результате конвективного согласования, P_c - суммарное количество выпавших осадков; 2) закон сохранения полной энергии:

$$\int_{z_b}^{z_t} c_p \tilde{T} \rho dz = \int_{z_b}^{z_t} c_p T \rho dz + L_e P_c; \quad (2.5.23)$$

3) «перемешивание» температуры и относительной влажности:

$$-\frac{\partial T}{\partial z} = \gamma_{cr}, \quad r = r_{cr}. \quad (2.5.24)$$

Из уравнений (2.5.22) – (2.5.24) следует, что

$$P_c = \int_{z_b}^{z_t} (q - \tilde{q}) \rho dz = \int_{z_b}^{z_t} (q - r_{cr} q_{\max}(\tilde{T})) \rho dz. \quad (2.5.25)$$

С помощью разложения в ряд Тейлора можно получить, что

$$\begin{aligned} P_c &= \int_{z_b}^{z_t} \left[q - r_{cr} q_{\max}(T) - r_{cr} \frac{\partial q_{\max}}{\partial T} (\tilde{T} - T) \right] \rho dz \approx \\ &\approx \int_{z_b}^{z_t} [q - r_{cr} q_{\max}(T)] \rho dz - r_{cr} \frac{\partial q_{\max}}{\partial T} (T^*) \int_{z_b}^{z_t} (\tilde{T} - T) \rho dz, \end{aligned}$$

где T^* – среднее по конвективному слою значение температуры. Подстановка в эту формулу выражения для $\tilde{T} - T$ из (2.5.23) приводит к соотношению:

$$P_c = \frac{1}{1 + \frac{L_e r_{cr}}{c_p} \frac{\partial q_{\max}}{\partial T} (T^*)} \int_{z_b}^{z_t} (r - r_{cr}) q_{\max}(T) \rho dz. \quad (2.5.26)$$

Следует заметить, что алгоритм параметризации сухой конвекции представляет собой частный случай изложенного выше с $\gamma_{cr} = \gamma_a$ и $P_c = 0$.

Проникающая конвекция. Если температура воздуха вблизи подстилающей поверхности выше порогового значения 287.15 К, то реализуется процедура расчета глубокой конвекции на основе метода, предложенного в работах (Betts and Miller, 1984, Betts, 1986). При этом также учитываются процессы образования крупномасштабных осадков, таяния снега и испарения при выпадении осадков.

Пусть в p -системе координат индексом b обозначены величины на нижней границе конвективного слоя, m – на уровне таяния, t – на верхней границе конвективного слоя, а индексом r – некоторые реперные величины. Для наступления глубокой конвекции необходимо, чтобы рассматриваемый объем воздуха обладал плавучестью, позволяющей ему переместиться с уровня b до уровня t и при этом не выйти за пределы тропосферы. Для столба воздуха между этими уровнями строятся реперные профили T_r и q_r , "приближающие" исходные величины T и q :

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{d.c.} = \frac{T_r - T}{\tau}, \quad \left. \frac{\partial q}{\partial t} \right|_{d.c.} = \frac{q_r - q}{\tau}, \quad (2.5.27)$$

где τ – характерное время глубокой конвекции (12 часов). Реперные профили строятся по следующим законам, полученным из обработки данных наблюдений. Ниже уровня таяния

$$\frac{\partial \theta_r}{\partial p} = \beta \left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{ma}, \quad (2.5.28)$$

где θ – потенциальная температура, «подгоночный» параметр β определяет степень перемешивания облачного воздуха с окружением и

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{ma} = p^{-c_p/c_v} \left[-\frac{c_p T}{c_v p} + \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{ma} \right], \quad (2.5.29)$$

причем

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{ma} = \frac{RT}{c_p p} \frac{1 + \frac{L_e q_{\max}}{RT}}{1 + \frac{L_e}{c_p} \frac{\partial q_{\max}}{\partial T}}. \quad (2.5.30)$$

Выше уровня таяния $\partial \theta_r / \partial p$ не зависит от давления и $\theta_r(p_t) = \theta(p_t)$.

В расчетах используется величина δp , представляющая собой разность давлений, соответствующая расстоянию, на которое надо адиабатически переместить данную частицу воздуха, чтобы в ней началась конденсация. Задаются реперные значения δp в верхней и нижней части конвективного слоя, а также на уровне таяния: $\delta p_b = -90$ гПа, $\delta p_m = -70$ гПа, $\delta p_t = -40$ гПа. Значения δp в других областях конвективного слоя задаются линейной интерполяцией в p -координатах.

Из этих условий можно однозначно найти реперные значения температуры и влаги, если привлечь дополнительно условие сохранения энергии:

$$\int_{p_b}^{p_t} (c_p T + L_e q) dp = \int_{p_b}^{p_t} (c_p T_r + L_e q_r) dp. \quad (2.5.31)$$

При этом количество влаги, выпавшей в виде осадков, вычисляется следующим образом:

$$P_c = \frac{\delta t}{g} \int_{p_b}^{p_t} \frac{q_0 - q_r}{\tau} dp, \quad (2.5.32)$$

где q_0 – профиль удельной влажности до наступления конвекции, δt – временной интервал, для которого рассчитывается конвекция. Если осадки получаются отрицательными, то считается, что в данной точке не хватает влаги для реализации глубокой конвекции и имеет место мелкая конвекция.

Полное количество конвективных облаков A_{ct} можно рассчитать, следуя работе (Slingo, 1987), по значению конвективных осадков P_c :

$$A_{ct} = a + b \ln(1 + c P_c), \quad (2.5.33)$$

где постоянные $a = 0.2$ и $b = 0.125$ определены «подгоночным» образом в результате сравнения модельных расчетов с данными наблюдений, $c = 1 \text{ м}^2/\text{кг}$. Считается, что

величина A_{ct} представляет собой суммарное по всем конвективным слоям количество облаков при случайном перекрывании слоев между соответствующими уровнями p_t и p_b . Количество конвективных облаков A_c в каждом отдельном слое между p_t и p_b можно определить по следующей формуле:

$$A_c = 1 - (1 - A_{ct})^{1/(|k_b - k_t| + 1)}, \quad (2.5.34)$$

где k_b и k_t – номера соответствующих модельных уровней. Как правило, широтная зона действия механизма глубокой конвекции в процессе образования облаков не выходит за пределы тропической области, но определяет в ней основную их массу. Вне высот с уровнями k_t и k_b величина A_{ct} равна нулю.

В столбе воздуха, где реализуется глубокая или мелкая конвекция, проводится также конвективное «перемешивание» профилей горизонтальных компонент скорости:

$$(u, v) := (1 - \alpha)(u, v) + \alpha(\bar{u}, \bar{v}), \quad (2.5.35)$$

где операция

$$\bar{\psi} = \frac{1}{p_b - p_t} \int_{p_t}^{p_b} \psi(p) dp$$

представляет собой осреднение по всему конвективному слою, а α – числовой множитель, пропорциональный количеству конвективных осадков в случае глубокой конвекции и равный единице для мелкой конвекции.

Мелкая конвекция. Этот процесс может осуществиться, если в столбе воздуха есть влажная неустойчивость, но глубокая конвекция не реализуется из-за того, что верхняя граница конвективного слоя находится слишком низко, или для ее работы недостаточно влаги (отрицательное количество осадков). Тенденции T и q за счет мелкой конвекции выглядят так же, как и в случае глубокой (2.5.27), но реперные профили строятся по другим законам. А именно, величина δp не зависит от давления, а профиль реперной эквивалентно-потенциальной температуры насыщения θ_{es} является линейным:

$$\theta_{es}(p) = \theta_{es}(p_b) + \left(\frac{\partial \theta_{es}}{\partial p} \right)_r (p - p_b), \quad (2.5.36)$$

причем

$$\left(\frac{\partial \theta_{es}}{\partial p} \right)_r = \frac{\bar{\theta}_e - \theta_e(p_b)}{\bar{p}_{sat} - p_{sat}(p_b)}. \quad (2.5.37)$$

Здесь чертой сверху обозначены средние величины, $\bar{\theta}_e = \left(\bar{T} + \frac{L_e}{c_p} \bar{q} \right) \bar{p}^{-\kappa}$, p_{sat} – давление, при котором наступает насыщение воздуха, адиабатически поднимающегося со среднего уровня $\bar{p}$ или с уровня p_b .

Для вычисления средних величин используются полусуммы величин с верхнего и нижнего уровней: $\bar{\psi} = [\psi(p_b) + \psi(p_t)] / 2$ ($\psi = p, T, q$). Величина δp определяется как

$$\delta p := \frac{1}{2} \left(\overline{\delta p} + \frac{1}{p_b - p_t} \int_{p_t}^{p_b} \delta p dp \right), \quad (2.5.38)$$

где профиль δp в правой части (2.5.38) рассчитывается по формуле

$$\delta p = \frac{p[q - q_{\max}(T, p)]}{\frac{RT}{c_p} \frac{\partial q_{\max}(T, p)}{\partial T} - q_{\max}(T, p)}, \quad (2.5.39)$$

причем $p_{\max} = p + \delta p$, а $\overline{\delta p} = \delta p(\bar{T}, \bar{q}, \bar{p})$. Считая, что $(\theta_{es}(p_b))_r = \theta_{es}(p_b)$, можно построить первоначальный реперный профиль температуры, а затем по значениям эквивалентно-потенциальной температуры насыщения θ_{es} вычислить абсолютную температуру T , рассчитать дисбаланс тепла в столбе воздуха

$$c_p \delta T = \frac{1}{p_b - p_t} \int_{p_t}^{p_b} c_p [T_r(p) - T(p)] dp \quad (2.5.40)$$

и скорректировать профиль T_r :

$$T_r(p) := T_r(p) - \delta T. \quad (2.5.41)$$

По значениям реперной температуры вычисляется реперный профиль влажности, рассчитывается дисбаланс влагосодержания

$$\delta q = \frac{1}{p_b - p_t} \int_{p_t}^{p_b} [q_r(p) - q(p)] dp \quad (2.5.42)$$

и корректируется профиль q_r :

$$q_r(p) := q_r(p) - \delta q. \quad (2.5.43)$$

Эти реперные профили принимаются в качестве окончательных распределений.

2.6. Гравитационно-волновое сопротивление и ионное трение

Параметризация гравитационно-волнового сопротивления представляет собой учет переноса импульса и энергии гравитационными волнами, которые генерируются, в основном, в тропосфере и разрушаются в более высоких слоях - стратосфере и мезосфере. Существуют параметризации двух типов. К первому из них относится параметризация орографического сопротивления, представляющая собой учет эффекта волн, генерируемых взаимодействием крупномасштабного потока с неоднородностями поверхности Земли. В параметризации второго типа (неорографического сопротивления) рассматриваются гравитационные волны, генерируемые другими источниками, например вертикальным сдвигом скорости ветра и конвекцией.

Неорографическое гравитационно-волновое сопротивление. Учет этого вида волнового сопротивления необходим при моделировании стратосферы и особенно мезосферы, где обрушение гравитационных волн решающим образом влияет на средний поток. Первые попытки учесть это влияние были связаны с введением так называемого поглощающего слоя на основе ньютоновского трения на верхних модельных уровнях. Более детальный способ учета гравитационных волн (с заданными пространственными и временными волновыми числами), следует из результатов работы (Lindzen, 1981), в которой рассматриваются теоретические основы описания гравитационно-волнового сопротивления. В работах (Hines, 1997a, 1997b) предложена параметризация, в которой рассматривается спектр распространяющихся волн с различными вертикальными волновыми числами. Предполагается, что гравитационные волны генерируются на заданном уровне и распространяются вверх, перенося импульс и энергию. Конвергенция потоков импульса и энергии из-за разрушения волн приводит к изменению горизонтального импульса и температуры. Именно эта параметризация используется в модели Института вычислительной математики РАН.

Все горизонтальные направления, в которых могут распространяться гравитационные волны, разбиты на N азимутов (далее ξ – индекс азимута). Порождаемый ими вертикальный поток горизонтального импульса в направлении ξ записывается в виде

$$F_{\xi} = \overline{\rho v'_{\xi} w'}, \quad (2.6.1)$$

где v_{ξ} – компонента скорости горизонтального ветра в рассматриваемом направлении; w – вертикальная скорость, рассчитываемая в z -системе координат; штрихи означают возмущения, наведенные гравитационными волнами, а черта сверху – осреднение по времени. Зональная F_{λ} и меридиональная F_{φ} компоненты волнового потока импульса рассчитываются с помощью следующих соотношений:

$$F_{\lambda} = \sum_{\xi=1}^N \cos \alpha_{\xi} F_{\xi}, \quad F_{\varphi} = \sum_{\xi=1}^N \sin \alpha_{\xi} F_{\xi}, \quad (2.6.2)$$

где α_{ξ} – угол между вектором горизонтальной скорости основного движения и направлением ξ . Тенденции для соответствующих компонент скорости ветра u и v вследствие разрушения гравитационных волн вычисляются затем как

$$\left[\frac{\partial(u, v)}{\partial t} \right]_{gw} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_{(\lambda, \varphi)}}{\partial z}. \quad (2.6.3)$$

Аналогичным образом получается выражение для источника тепла и коэффициента вертикальной диффузии, обусловленных разрушением гравитационных волн. В рассмотрение вводится вертикальный поток тепловой энергии через единичную площадку

$$E = \overline{p' w'}, \quad (2.6.4)$$

где p' – возмущение давления за счет гравитационных волн. Предполагается, что этот поток формируется в результате суммарного эффекта процессов вертикального переноса энергии гравитационными волнами, распространяющимися в различных горизонтальных

направлениях ξ . Тенденция температуры, обусловленная конвергенцией потока E , вычисляется как

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{gw} = -\frac{1}{c_p \rho} \frac{\partial E}{\partial z}. \quad (2.6.5)$$

В модели ИВМ РАН количество азимутов, на которые разбиваются все горизонтальные направления, положено равным 12. Значения "подгоночных" параметров выбраны в диапазонах, рекомендованных в публикациях (Hines, 1997a, 1997b), и близки к тем, что используются в работах (Manzini et al., 1997a, 1997b).

Орографическое гравитационно-волновое сопротивление. Параметризация орографического гравитационно-волнового сопротивления построена на основе метода, предложенного в (Palmer et al., 1986). Используются квадрат частоты Вейселя-Брента $N^2 = -\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}$, число Ричардсона $Ri = N^2 / \left| \partial \vec{V} / \partial z \right|^2$ и операция осреднения (обозначаемая далее чертой сверху) по столбу воздуха, заключенного между некоторым уровнем z_i и поверхностью Земли. Тогда

$$u_p = \frac{\bar{u}u + \bar{v}v}{\sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}} \quad (2.6.6)$$

есть проекция осредненного вектор скорости ветра на его направление в приземном слое. Если обозначить

$$\mu = 2 + \sqrt{Ri^{-1}}, \quad h^2 = \left[u_p (2\sqrt{\mu} - \mu) \right]^2 / N^2, \quad d_s^2 = \min(\delta, h^2), \quad (2.6.7)$$

где δ – величина, характеризующая подсеточную дисперсию орографии, то напряжение трения на поверхности, вызванное гравитационными волнами, может быть записано в виде

$$\tau_{ws} = K \bar{\rho} d_s^2 \bar{N} \sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}, \quad (2.6.8)$$

где числовой коэффициент K в модели ИВМ РАН принят равным $4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^{-1}$.

Принимается, что в слое ниже уровня z_i напряжение τ_w не меняется с высотой (используется его значение на поверхности), а выше этого уровня оно вычисляется в зависимости от волнового числа Ричардсона

$$Ri_w = \frac{(1 - \alpha) Ri}{(1 + \alpha \sqrt{Ri})^2}, \quad (2.6.9)$$

где $\alpha = Nd |u_p|^{-1}$, а $d = \sqrt{\tau_w (K \rho N |u_p|)^{-1}}$. При этом, тенденции составляющих скорости и температуры, обусловленные орографическим волновым сопротивлением, могут быть вычислены следующим образом:

$$\left[\frac{\partial(u, v)}{\partial t} \right]_{gw} = \frac{(\bar{u}, \bar{v})}{\rho \sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}} \frac{\partial \tau_w}{\partial z},$$

$$c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_{gw} = \frac{1}{4} \left[u^2 - \left(u + 2 \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + v^2 - \left(v + 2 \frac{\partial v}{\partial t} \right)^2 \right]. \quad (2.6.10)$$

Ионное трение. Как отмечалось в разделе 1.1, вертикальная структура земной атмосферы допускает разделение на слои в соответствии с профилем средней температуры. Несмотря на существенные внутренние отличия, тропосфера, стратосфера и мезосфера представляют собой достаточно однородную (перемешанную) смесь газов с близкими динамическими характеристиками. Слой термосферы (выше мезопаузы ~ 90 км до экзопазы на высоте около 500 км) является сильно разреженным газом, для которого еще применима теория гидродинамики сплошной среды. Однако воздух настолько разрежен, что благодаря большой длине свободного пробега частиц усиливается вертикальная молекулярная диффузия, так что газ становится стратифицированным покомпонентно. Другой ключевой особенностью термосферы является резкий рост температуры с высотой, который происходит за счет сильного поглощения коротковолновой солнечной радиации. Этот слой также связан с рассматриваемой отдельно частью земной атмосферы, называемой ионосферой и представляющей собой среду заряженных частиц, непрерывно появляющихся и исчезающих под действием солнечного излучения.

Таким образом, физические и химические процессы, определяющие глобальную структуру термосферы, существенно отличаются от того, что имеет место в нижних слоях атмосферы. Эта структура определяется, главным образом, поглощением ультрафиолетового излучения (UV, излучение с длинами волн от 130 нм до 175 нм) и экстремального ультрафиолетового излучения (EUV, излучение с длинами волн короче 103 нм), которые могут ионизировать или диссоциировать различные газовые составляющие в термосфере. Именно высокоэнергичное EUV-излучение создает основную часть ионосферы, которая ведет себя как слабо ионизированная плазма, взаимодействующая с нейтральными частицами, составляющими термосферу. Это же излучение диссоциирует молекулярные составляющие O₂ и N₂ на атомарные кислород и азот таким образом, что состав атмосферы меняется от молекулярного газа на уровне мезопаузы (80-90 км) до атомарного газа на высоте экзопазы (500 км). Около 33% суммарного EUV- и UV-излучения идет на локальный нагрев нейтральных составляющих термосферы, а остальная часть энергии либо тратится на обратное излучение, либо проникает в нижние слои, либо расходуется на химические реакции диссоциации.

Процессы инфракрасного излучения атомарными составляющими в термосфере относительно слабы и недостаточны для поддержания радиационного баланса. Поэтому термосфера охлаждается направленными вниз молекулярными и вихревыми потоками тепла (в области с высоты около 120 км до границы мезосферы), где инфракрасное излучение становится достаточным для переноса энергии вверх. Такая теплопроводность обуславливает существенный положительный градиент температуры по высоте. В верхней термосфере благодаря ее сильной разреженности молекулярная теплопроводность становится достаточно большой и обеспечивает распределение, при котором температура фактически не меняется с высотой, принимая значения, характерные для экзосферы. В зависимости от уровня солнечной активности эти экзосферные значения температуры могут изменяться более чем в 2 раза (от 500 до 1000 K), обуславливая тем самым временную изменчивость температуры и плотности в термосфере. Наряду с этой изменчивостью, связанной преимущественно с 11-летним циклом, существует высокочастотная изменчивость, наведенная вариациями излучения солнечной короны (часовой, суточный и 27-суточный циклы).

Для термосферы существенными также являются авроральные явления (видимые с поверхности Земли как полярные сияния), представляющие собой интенсивный поток заряженных частиц из магнитосферы вдоль силовых линий магнитного поля в полярных областях, то есть там, где они сходятся по направлению к центру Земли, поскольку магнитное поле планеты в первом приближении представимо диполем. Энергия и импульс, передаваемые нейтральному газу, сильно зависят от степени взаимодействия солнечного ветра с магнитным полем Земли. Энергичные заряженные протоны и электроны «бомбардируют» полярный регион и ионизируют нейтральные составляющие, возбуждая различные полярные свечения. В связи с этим проникновением заряженных частиц возникает сильный циркумполярный электрический поток, джоулево рассеяние которого нагревает полярные области термосферы. Этот нагрев значительно изменяется в зависимости от уровня солнечной активности и составляет величину $10^{10} - 10^{12}$ Вт в небольшой области вокруг полюса. Через столкновение заряженных частиц с движущимися ионами происходит передача импульса нейтральному газу.

Таким образом, для точного расчета средней структуры термосферы необходимо совместно решать многокомпонентные уравнения, учитывающие баланс притока и стока тепла. Состав термосферы нельзя считать однородным, а для описания происходящих в ней процессов следует принимать во внимание как вихревой перенос, так и вертикальную молекулярную диффузию, а также механизмы, связанные с ионизацией и рекомбинацией, обеспечивающие обмен частицами между термосферой и ионосферой. Общая картина циркуляции термосферы представляет собой ярко выраженный дневной цикл с описанными выше особенностями, проявляющийся, в основном, в термических приливах суточной и полусуточной моды. Необходимо также отметить существенную разницу между нижними и верхними слоями термосферы, где оптические свойства газа меняются так, что верхние слои фактически являются оптически прозрачными (рассеяние света незначительно), а нагрев там нелокален и равномерен с сильным контрастом между днем (при освещении Солнцем) и ночью.

Уравнения движения, описывающие динамику термосферы, остаются теми же самыми, что и для нижних слоев атмосферы, однако их необходимо модифицировать с учетом трех ключевых, характерных для этих высот, процессов. К ним относятся: вязкое трение за счет молекулярной диффузии, обмен импульсом и энергией с заряженными частицами при столкновениях (так называемое ион-нейтральное трение) и ускорение вследствие возмущений в градиенте давления, обусловленных неоднородностями молекулярного состава термосферы. Вследствие сильной вертикальной диффузии применимо соотношение гидростатики, однако газы разделены с высотой по молекулярным массам и потому неоднородность состава должна учитываться при записи приближения гидростатики. Основная сложность этих уравнений содержится в описании притоков и стоков тепла, которые в данной системе нелинейны по всем переменным.

Кинематическая молекулярная диффузия растет с высотой экспоненциально на несколько порядков, так что, аналогично температуре, с высот около 300 км скорость ветра практически постоянна с высотой. Эта сила предотвращает развитие значительных горизонтальных сдвигов и турбулентных структур в полях скорости ветра. Данный процесс параметризуется через правую часть уравнений движения для горизонтальных компонент скорости в виде $\frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{\partial \vec{u}}{\partial z}$, где μ – коэффициент вязкости.

Сила ион-нейтрального трения, учитывающая столкновения заряженных частиц ионосферы и нейтральных частиц термосферы, может быть выражена в виде

$$\vec{F}_{in} = -\frac{1}{\rho} D(\vec{u} - \vec{u}_i), \quad (2.6.11)$$

где $\vec{u}_i$ – скорость ионов, D – тензор коэффициентов сопротивления, записанный только для горизонтальных компонент

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ -D_{xy} & D_{yy} \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты сопротивления могут быть вычислены как

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \sigma_P B^2, \\ D_{xy} &= \sigma_H B^2 \sin I, \\ D_{yy} &= \sigma_P B^2 \sin^2 I, \end{aligned} \quad (2.6.12)$$

где I – угол наклона (между горизонтальной плоскостью и вектором магнитного поля), σ_P – электропроводность Педерсена, σ_H – электропроводность Холла, B – величина магнитного поля Земли, которая оценивается как поле диполя: $B(r, \theta) = \frac{P_m}{r^3} \sqrt{1 + 3 \sin^2 \theta}$, где $(90 - \theta)$ – угол между магнитной осью и местом наблюдения (магнитная широта), P_m – магнитный дипольный момент Земли.

Как видно из уравнений, эти коэффициенты отражают природу трения и характеризуют сопротивление основному потоку. На дневной стороне Земли ионизация вследствие поглощения излучения Солнца велика, так что ион-нейтральное трение значительно и фактически уравнивает по величине барические градиенты для высот ~ 300 км. Скорость ветра направлена вдоль поверхностей постоянного давления от нагретых регионов к охлажденным (ночным). На ночной стороне эта сила практически отсутствует. При этом неравномерность нагрева (ночное охлаждение) порождает движения воздуха с высокими скоростями и без сопротивления.

На высоте 300 км характерное значение скорости изменения для проводимости Педерсена на дневной стороне составляет величину порядка 10^{-3} с^{-1} . Характерная скорость изменения для проводимости Холла на дневной стороне максимальна на высоте ~ 125 км и по величине составляет около 10^{-4} с^{-1} , так что силы ионного трения в этом направлении сравнимы с силой Кориолиса. Столкновение заряженных и нейтральных частиц вносит также существенный вклад в тепловой баланс, которой может быть выражен джоулевым нагревом при упругих столкновениях:

$$Q_J = -\frac{1}{\rho} \left[D_{xx} (u - u_i)^2 + D_{yy} (v - v_i)^2 \right]. \quad (2.6.13)$$

Важнейшим процессом для термосферы, особенно на низких высотах, является взаимодействие с нижними слоями атмосферы, которое проявляется в проникновении приливных и гравитационных волн из мезосферы и существенном их воздействии на циркуляцию термосферы. Эти силы могут быть учтены при постулировании граничных условий или же как дополнительные внутренние силы.

ГЛАВА 3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Рассмотренные в предыдущих главах уравнения физики климатической системы в общем виде могут быть записаны следующим образом:

$$\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} + A\vec{\phi} = \vec{F},$$

где $\vec{\phi}$ – вектор состояния системы, A – сумма операторов, один из которых отвечает за трехмерную адвекцию, а другой представляет градиент давления и силу Кориолиса. Вектор правых частей $\vec{F}$ ответственен за источники и стоки вследствие физических процессов подсеточного масштаба (вертикальный турбулентный перенос, горизонтальная диффузия, орографические и неорографические гравитационные волны, конвекция, радиация и др.). Оператор A представляет собой динамические, существенно трехмерные, процессы (так называемый «динамический» блок моделей). При $\vec{F} = 0$ соответствующая система уравнений обладает интегральным законом сохранения полной энергии, что является основой построения консервативных разностных схем. Кроме консервативности, эти схемы должны адекватно воспроизводить конкретные физические процессы, такие как распространение инерционно-гравитационных волн, каскад энергии по спектру, развитие бароклинно неустойчивых волн, формирование турбулентных структур и др. Ниже приводится краткое описание некоторых из этих процессов.

3.1. Основные методы дискретизации уравнений математической физики

В общем виде уравнения, описывающие происходящие в климатической системе процессы, относятся к уравнениям математической физики. Они представляют собой нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных, основным современным подходом к решению которых является численное моделирование, а его теоретическим фундаментом – вычислительная математика, которая представляет собой теорию численных методов решения типовых математических задач (Hildebrand, 1974). Важной проблемой является вопрос о том, как численные методы, которые применяются для решения уравнений, могут затронуть само решение (Durrant, 1999). Различные технические факторы оказывают влияние на численные методы, используемые в конкретных задачах моделирования, включая вычислительную эффективность (скорость счета), точность, требования к памяти и простоту структуры программного кода. Последний фактор особенно важен, если модель предполагается для использования в образовательном процессе (студентами, аспирантами и т.п.).

Решение систем дифференциальных уравнений в частных производных представляет собой наиболее трудную проблему вычислительной математики, поскольку сложные системы вроде уравнений Навье-Стокса не поддаются, как правило, аналитическому решению. Методологической основой здесь является сведение задачи в конечном итоге к решению систем линейных (или нелинейных) алгебраических уравнений, теория и практика численного решения которых хорошо разработаны. Это сведение осуществляется средствами представления функций и их производных дискретными приближениями, в результате чего задача в бесконечномерной постановке (системы дифференциальных уравнений записываются и решаются для функций из бесконечномерных пространств) трансформируется в ее конечномерный аналог (Самарский и Гулин, 1989). При этом между аналитическими и численными методами решения возникают существенные различия: численные решения являются

приближенными и «локальными», т.е. всегда относятся к заданному набору параметров, а аналитические решения – точны и глобальны. Ошибки решения, порождаемые численным методом, можно классифицировать на ошибки округления, аппроксимации и неустойчивости (Демидович и Марон, 1966).

Ошибки округления, как правило, менее существенны, чем порождаемые другими источниками, однако они становятся важными, когда происходит добавление небольших величин к крупным или рассматривается малая разность больших величин. Особенно это заметно, когда речь идет о суммировании рядов, так что хорошей практикой является использование двойной точности для переменных при расчете сумм.

Ошибки аппроксимации связаны непосредственно с дискретизацией уравнений и неизменно возникают, когда непрерывные функции представлены дискретной функцией (значениями в точках). В целом, чем больше значений используется для аппроксимации функции, тем более точным будет приближение. При этом разрешение, необходимое для снижения локальной погрешности до приемлемого уровня, зависит от приближаемой функции. Именно минимизация этих ошибок является приоритетом при построении численного метода.

Непосредственно переходя к проблеме дискретизации систем уравнений в частных производных, следует заметить, что в большинстве прикладных задач необходимо проводить дискретизацию функций как по пространственным переменным, так и по времени и эти два типа вычислений принципиально отличаются друг от друга. Различные подходы дают различную точность решения (ошибку аппроксимации дискретной функцией решений непрерывных уравнений), скорость счета, устойчивость вычислительного процесса (Бахвалов и др., 2003).

Основным методом дискретизации, используемым для аппроксимации дифференциальных уравнений, является метод конечных разностей (Гельфонд, 1959), в котором функции представлены их значениями в определенных точках сетки, заданной на области определения пространственных переменных, а производные аппроксимируются через разности этих значений. В геофизических приложениях получили широкое распространение так называемые *A*, *B* и *C* сетки, предложенные А. Аракавой (Aragawa, 1972). На сетке *A* все дискретные функции, как скалярные, так и векторные, определены в узлах сеточной области. На сетке *B* скалярные функции (температура, давление, геопотенциал и т.д.) задаются в узлах, а векторные функции (скорость течения) определены в центрах конечно-разностных ячеек. На сетке *C* скалярные величины определяются в центрах ячеек, а компоненты скорости (u, v, w) – в центрах (x, z) -, (y, z) - и (x, y) -граней, соответственно.

Конечно-разностная методика основана на выборе некоторого конечного числа расчетных точек и разложении функций в ряд Тейлора в окрестности этих точек. Действительно, любую функцию, имеющую производные до степени $(n+1)$ включительно, можно представить в виде

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}h^n + O(h^{n+1}) \quad (3.1.1)$$

в окрестности некоторой точки x_0 и получить для первой производной

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} [f(x_0 + h) - f(x_0)] + O(h) \quad , \quad (3.1.2)$$

где h – шаг дискретной сетки, и аналогичным образом для других производных (Бахвалов и др., 2003). Таким образом, производные любого порядка можно приблизить конечными

разностями значений функций в некоторых точках, а само дифференциальное уравнение представить алгебраическим уравнением, называемым конечно-разностной схемой.

Аппроксимация функций и их производных по времени представляет отдельную проблему, поскольку для дифференциальных уравнений, описывающих динамические системы (в частности атмосферные и океанические течения), в силу теоремы Коши и ее аналогов (при определенной корректности задачи) поведение системы в каждый следующий момент времени определено предыдущим. Таким образом, дискретизация сводится к нескольким (чаще всего двум) шагам, а интегрирование по времени представляет собой расчет следующего шага схемы по предыдущему.

Для пространственной аппроксимации важно корректное и точное разрешение всей области (и чаще всего – граничных условий). Точки значений функций, для которых берутся конечные разности, называют узлами сетки, а сама расчетная сетка представляет собой способ их расположения внутри области. Качество построения расчетной сетки в значительной степени определяет успех численного решения уравнения. Уравнения моделей геофизических течений часто решаются в точках, определяемых на квазирегулярных, трехмерных пространственных сетках. Термин "квазирегулярные" означает, что узлы такой сетки расположены не совсем равномерно, как это имеет место, например, для широтно-долготной сетки или адаптивной сетки, где разрешение увеличивается в районах сильных градиентов.

Хотя формальное определение конечно-разностной схемы не накладывает существенных ограничений на вид алгебраических уравнений, но на практике имеет смысл рассматривать только те схемы, которые каким-либо образом отвечают свойствам дифференциальной задачи. Важными понятиями теории разностных схем являются сходимость, аппроксимация, устойчивость и консервативность (Бабенко, 1986). Для того, чтобы разностные уравнения были как-то связаны с приближаемым дифференциальным оператором, необходимо, чтобы они точно аппроксимировали многочлены. Если конечно-разностные уравнения выполняются для всех многочленов степени не выше n с точностью до $O(h^n)$, то говорят, что разностная схема имеет n -ый порядок аппроксимации. Исходя из описанного выше основного подхода к построению конечно-разностных приближений – разложения в ряды Тейлора, можно достаточно просто оценивать порядок аппроксимации через остаточный член разложения, который в общем случае является функцией $O(h^{n+1})$.

Условия аппроксимации не достаточно для того, чтобы результат разностной схемы приближался к точному решению при $h \rightarrow 0$. В случае схем, коэффициенты которых не зависят от решения дифференциального уравнения, нужно выполнение условия устойчивости. Это понятие имеет большое значение во всей вычислительной математике и касается чувствительности решения к малым изменениям входных данных (начальных условий или внешнего воздействия). Задача называется вычислительно неустойчивой, если малые изменения входных данных приводят к заметным изменениям решения. В общем виде проблему вычислительной устойчивости можно рассмотреть, представив схему как некоторый линейный оператор, который преобразует значения функции в момент t в значения функции в момент $t + \tau$, где τ – шаг по времени. Условие устойчивости требует, чтобы норма этого оператора не превосходила $1 + c\tau$ при $\tau \rightarrow 0$, где c – некоторая константа. Если это условие не выполнено, то погрешности схемы быстро нарастают. Если выполнены как условие аппроксимации, так и условие устойчивости, то результат разностной схемы сходится при измельчении сетки к решению дифференциального уравнения (Рябенский и Филиппов, 1956).

Для методов дискретизации по времени принята следующая классификация: двух-, трех- и многослойные схемы. Для задачи

$$\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + A\vec{\varphi} = 0, \quad (3.1.3)$$

где A – оператор задачи (для простоты – линейный), общий вид двухслойной схемы можно записать следующим образом:

$$\frac{\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^n}{\tau} + \alpha A\vec{\varphi}^{n+1} = -(1-\alpha)A\vec{\varphi}^n, \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (3.1.4)$$

Здесь n – номер временного слоя. В явных схемах ($\alpha = 0$, метод ломаных Эйлера) оператор задачи применяется только к решению с предыдущего по времени шага n и, таким образом, прогностические уравнения можно разрешить относительно значения зависимой переменной на новом $(n+1)$ -ом шаге. Явные схемы часто оказываются неустойчивыми. Согласно теореме Годунова (Годунов и др., 1976) среди линейных разностных схем для уравнения переноса с порядком аппроксимации выше первого нет устойчивых. Таким образом, все устойчивые схемы высокого порядка аппроксимации должны быть нелинейными (несмотря на линейность исходного уравнения).

В неявных схемах ($\alpha = 1$) оператор задачи применяется к зависимым переменным на новом шаге по времени и зачастую решение должно быть получено итеративно. Неявные схемы обычно являются устойчивыми. Остальные методы по существу являются обобщением и развитием этих двух.

В полунеявных схемах некоторые слагаемые в уравнениях аппроксимируются неявно, а другие берутся в явном виде (как правило, явные или неявные шаги чередуются). В качестве примера можно упомянуть часто используемую схему Кранка-Николсон (Crank and Nikolson, 1947), в которой $\alpha = 0.5$, т.е. решение берется в виде среднего от явной и неявной схемы решения для повышения точности и устойчивости. К сожалению, при моделировании сложных систем вычислительная экономия от увеличения шага по времени, как правило, «съедается» большими вычислительными затратами при проведении расчета на каждом шаге по времени.

Метод расщепления, в которых сложный оператор задачи представлен суммой более простых

$$A = \sum_{k=1}^K A_k, \quad (3.1.5)$$

реализует процесс вычислений в виде последовательности «дробных» шагов, например, на основе схемы Кранка-Николсон:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{\varphi}^{n+1/K} - \vec{\varphi}^n}{\tau} + \frac{1}{2} A_1 (\vec{\varphi}^{n+1/K} + \vec{\varphi}^n) &= 0, \\ \frac{\vec{\varphi}^{n+2/K} - \vec{\varphi}^{n+1/K}}{\tau} + \frac{1}{2} A_2 (\vec{\varphi}^{n+2/K} + \vec{\varphi}^{n+1/K}) &= 0, \\ &\dots\dots\dots, \\ \frac{\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^{n+(K-1)/K}}{\tau} + \frac{1}{2} A_K (\vec{\varphi}^{n+1} + \vec{\varphi}^{n+(K-1)/K}) &= 0. \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

Этот метод оказался эффективным инструментом геофизического моделирования

(Марчук, 1967). А. Робером был предложен (Робер, 1982) полунеявный метод, позволивший в несколько раз повысить шаг по времени по сравнению с явными схемами интегрирования. Данный метод, в котором линейные слагаемые рассчитываются по неявной схеме, а нелинейных – по явному алгоритму, используется во многих атмосферных моделях. В негидростатических моделях, в основном, применяются явно-неявные схемы, сочетающие расщепление по физическим процессам и неявное интегрирование только по вертикальной координате. Шаг по времени в таких схемах определяется самыми быстрыми волновыми процессами в системе – гравитационными или звуковыми колебаниями.

Из трехслойных схем (Dugan, 1999) в геофизических приложениях наиболее часто используются схемы второго порядка «чехарда»

$$\frac{\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^{n-1}}{2\tau} + A\vec{\varphi}^n = 0 \quad (3.1.7)$$

и схема Адамса-Бэшфорта

$$\frac{\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^{n-1}}{\tau} + \frac{1}{2} A(3\vec{\varphi}^n - \vec{\varphi}^{n-1}) = 0. \quad (3.1.8)$$

Примером многослойной схемы может служить общая схема Адамса-Бэшфорта K -го порядка:

$$\frac{\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^n}{\tau} + \sum_{k=0}^{K-1} \alpha_k A\vec{\varphi}^{n-k} = 0, \quad \sum_{k=0}^{K-1} \alpha_k = 1 \quad (3.1.9)$$

и ее частный случай третьего порядка с $\alpha_0 = 23/12$, $\alpha_1 = -4/3$ и $\alpha_2 = 5/12$.

Для решения задачи Коши системы обыкновенных дифференциальных уравнений, к которым сводятся после пространственной дискретизации исходные дифференциальные уравнения в частных производных (3.2.3)

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dt} &= F(\Phi), \\ \Phi|_{t=t_0} &= \Phi_0 \end{aligned}, \quad (3.1.10)$$

эффективным оказался метод В.И. Лебедева (Лебедев, 1991). Предполагается, что функции $F(\Phi)$ и $\Phi(t)$ являются достаточно гладкими по времени, чтобы их можно было заменить дифференциальным уравнением с заданным порядком локальной аппроксимации. Более точно, для любого ε (точность локальной аппроксимации) найдется $0 < \delta < T$ такое, что если $0 < \Delta t \leq \delta$, то выполняется следующее равенство

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{\Phi(t + \Delta t) - \Phi(t)}{\Delta t} + \eta(t), \quad (3.1.11)$$

где $\|\eta(t)\| \leq \varepsilon$ для всех $t \geq 0$.

Приближенное решение $\Phi^n = \Phi(t_n)$ задачи (3.1.10) отыскивается с помощью явной разностной схемы следующего вида:

$$\begin{aligned}
\Phi^0 &= \Phi_0, \\
\Phi_0^* &= \Phi^n, \quad t_0^* = t_n, \\
\Phi_{m+1/2}^{**} &= \Phi_m^* + \tau_{m+1} F(\Phi_m^*), \\
t_{m+1/2}^* &= t_m^* + \tau_{m+1}, \\
\Phi_{m+1}^{**} &= \Phi_{m+1/2}^{**} + \tau_{m+1} F(\Phi_{m+1/2}^{**}), \\
\Phi_{m+1}^* &= \Phi_{m+1}^{**} + \gamma_{m+1} \tau_{m+1} [F(\Phi_m^*) - F(\Phi_{m+1/2}^{**})], \\
t_{m+1}^* &= t_{m+1/2}^* + \tau_{m+1} \\
(m &= 0, 1, \dots, M-1), \\
\Phi^{n+1} &= \Phi_{M(n)}^*, \quad t_{n+1} = t_{M(n)}^* \\
(n &= 0, 1, 2, \dots),
\end{aligned} \tag{3.1.12}$$

где числовые последовательности τ_m и γ_m строятся с учетом спектральных свойств решения. В этой схеме выполняются два цикла. Внешний цикл выполняется с «большим» шагом по времени $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$, который зависит от заданной точности локальной аппроксимации ε . Другой цикл – внутренний, включающий ряд «промежуточных» шагов по времени $M(n)$ и построенный таким образом, чтобы гарантировать устойчивость вычислений.

Матрица Якоби для системы (3.1.10) имеет следующий вид:

$$J = \left\| \frac{dF_i}{d\Phi_j} \right\|.$$

Пусть $Sp(J)$ есть спектр матрицы J , а (λ_i, φ_i) есть пара, включающая собственное значение и собственный вектор J , причем $\{\varphi_i\}$ образуют базис. Предполагается также, что спектр J находится в левой полуплоскости комплексной плоскости $\lambda = \lambda_r + i\lambda_i$ в круге C_r минимального радиуса $r > 0$: $C_r = \{\lambda : |\lambda + r| \leq r\}$. Удобно в качестве временного масштаба рассматриваемой задачи Коши использовать масштаб Куранта $\text{Cou} = r^{-1}$. В простейшей явной разностной схеме точности $O(\tau)$ с постоянным шагом по времени

$$\Phi^{n+1} = \Phi^n + \tau F(\Phi^n),$$

причем шаг $\tau \leq \text{Cou}$.

Линеаризация по Φ системы уравнений (3.1.10) в окрестности Φ_0 дает

$$\begin{aligned}
\frac{d\Phi}{dt} &= A\Phi, \\
\Phi|_{t=0} &= \Phi_0,
\end{aligned} \tag{3.1.13}$$

где $A = J(\Phi_0)$. Формулы явного метода Эйлера выглядят следующим образом:

$$\Phi^{n+1} = (I + \tau_n A) \Phi^n, \tag{3.1.14}$$

где I – единичная матрица. Пусть

$$\Phi_0 = \sum_{i=1} a_i \varphi_i ,$$

тогда решение задачи (3.1.13) можно записать в следующем виде:

$$\Phi(t) = \sum_{i=1} a_i \exp(\lambda_i t) \varphi_i = \exp(At) \Phi_0 .$$

Цикл из M шагов расчета по формуле (3.1.14), начиная с $t_0 = 0$, приводит к соотношению $\Phi^M = P_M(A) \Phi_0$, где полином

$$P_M(\lambda) = \prod_{m=1}^M (1 + \tau_m \lambda) . \quad (3.1.15)$$

При этом $P_M(0) = 1$ и $t_M = \sum_{m=1}^M \tau_m = P'_M(0)$, где τ_m принимают значения, обратные корням многочлена $P_M(-\lambda)$. Из вида полинома

$$P_M(\lambda) = 1 + t_M \lambda + \sum_{i,k} \tau_i \tau_k \lambda^2 + \dots$$

можно сделать вывод, что

$$d(\lambda) = \exp(t_M \lambda) - P_M(\lambda) = O(\lambda^2) ,$$

т.е. оператор $P_M(A)$ аппроксимирует оператор $\exp(At)$.

Пусть максимальный шаг по времени Δt определен для заданной точности локальной аппроксимации $\varepsilon > 0$ условием (3.1.11). Естественно потребовать, чтобы были выполнены следующие условия для обеспечения малости ошибки локальной аппроксимации в цикле из M шагов:

$$\max_{1 \leq m \leq M} \tau_m = \Delta t, \quad \tau \leq t_M \leq \beta \Delta t ,$$

где некоторый параметр $\beta > 1$ не зависит от M . Если спектр якобиана J для любого t ограничен, а спектр матрицы A принадлежит симметричному по отношению к действительной оси комплексной плоскости замкнутому подмножеству S круга C_r , то алгоритм (3.1.14) устойчив, если имеют место (Lebedev, 1997): 1) спектральная устойчивость, т.е. $\sup_{\lambda \in Sp(A)} |P_M(\lambda)| \leq 1$, и 2) устойчивость вычислений внутри цикла из M

шагов. Оператор перехода разностной схемы (3.1.12) после M шагов принимает вид многочлена Чебышёва первого рода для схем первого порядка точности, многочлена Золотарёва – для схем второго порядка точности (Lebedev, 1994) или некоторых специальных многочленов – для схем третьего и четвертого порядка точности (Medovikov, 1998). При этом временные шаги равны обратным значениям полусуммы корней этих многочленов и гарантируют устойчивость и заданную точность.

Численные эксперименты с одной из версий вихреразрешающей модели конвективного пограничного слоя атмосферы (Луценко и др., 1999, Lebedev et al., 2000) показали, что с уменьшением размера ячейки пространственной сетки эффективность схемы Лебедева растет и уже на сетке в 64000 узлов требуется в 5 раз меньше

процессорного времени по сравнению со схемой «чехарда».

Консервативные схемы представляют особый интерес для решения гидродинамических проблем. Когда разностная схема удовлетворяет тем же интегральным соотношениям (например, закону сохранения энергии), что и первоначальное дифференциальное уравнение, то говорят о свойстве консервативности. Неконсервативные схемы порождают ложные источники и стоки в рассматриваемой системе (Thuburn, 2008), что может быть приемлемым до определенной степени в краткосрочных расчетах, но совершенно не годится для климатического моделирования. Таким образом, серьезное внимание необходимо уделять степени влияния этих ложных источников и стоков. Можно ожидать от модели «точного» решения задачи, если характерный временной масштаб искусственных численных источников велик по сравнению с масштабом истинных физических источников. Сохранение массы является одним из значимых интегральных законов сохранения, поскольку, в отличие от других величин, масса сохраняется в диссипационных процессах (притока/стока тепла или трения). Если масса не сохраняется, то это влияет на распределение поверхностного давления. Кроме того, если общая масса газа не сохраняется, то и не сохраняются массы различных ее составляющих, таких как водяной пар или долгоживущие химические вещества.

Следует заметить, что принципиальным является критерий Куранта (Courant et al., 1928), ограничивающий соотношение пространственных и временных шагов. В случае схем, коэффициенты которых не зависят от решения дифференциального уравнения, условие Куранта можно получить из критерия устойчивости. Для гиперболических систем уравнений это условие часто используется в виде $\tau \leq \min(h |\lambda|_{\max}^{-1})$, где $|\lambda|_{\max}$ – максимальное по модулю собственное значение оператора задачи в отдельной точке, а минимум берется по всем точкам сетки. В практических приложениях полезным является критерий $U\tau/h \leq 1$, согласно которому скорость распространения возмущений в разностной задаче не должна быть меньше, чем в дифференциальной. Другими словами, за один шаг по времени частица не должна «пробегать» более одной ячейки.

Метод конечных разностей на протяжении более 60 лет является базовым для построения геофизических моделей. Основные тенденции в развитии этих моделей связаны с улучшением и модификациями этого подхода. С повышением горизонтального разрешения в последние десятилетия стала заметна проблема неоднородности широтно-долготных сеток и сгущения их к полюсам. Это привело к разработке большого числа альтернативных сеток, представляющих собой различные варианты сеточных проекций на сферу, например, проекция куба на сферу (Durrant, 1999).

Можно назвать еще четыре основных метода, которые используются для пространственной аппроксимации нелинейных уравнений в задачах гидротермодинамики атмосферы и океана. Спектральный метод основан на представлении функций и их производных в качестве разложения по некоторым базисным функциям (например, с помощью рядов Фурье), ограничивая этот базис конечным числом, и таким образом сводя начальную бесконечномерную задачу к конечномерной. Вычислительная технология сводится к решению системы алгебраических уравнений для коэффициентов разложения (Hesthaven et al., 2007). Спектральный метод является базовым для многих его версий и широко применяется именно для геофизических задач. Так для задач на сфере можно применять в качестве функций Фурье – спектральные функции, основанные на полиномах Лежандра. Его особенностью является рассмотрение математической задачи (системы уравнений в частных производных) в так называемой слабой формулировке. Это делается умножением дифференциального уравнения на базисную функцию и интегрированием по всей области. Наиболее важным является выбор интерполяции и базисных функций.

Спектральный подход порождает достаточно много вычислительных и чисто технических проблем (высокий порядок для базисных функций, точность интегрирования уравнений, сложные программные коды и т.д.). Основные преимущества этого подхода

для решения геофизических задач состоят в следующем. Квадратичные нелинейные слагаемые вычисляются точно и потому отсутствует нелинейная неустойчивость. Нет пространственной ошибки аппроксимации, поскольку производные берутся аналитически и, таким образом, нет численной дисперсии волн и численной диффузии. Достаточно легко реализуются полуневявные разностные схемы.

Однако при линейной комбинации сферических гармоник, используемой для представления больших градиентов или разрывов, может проявиться эффект Гиббса в виде ложных волн. Например, в случае удельной влажности, это может привести к отрицательным значениям, не имеющим физического смысла, и, как следствие, к ложным осадкам. Для высоких разрешений спектральные модели вычислительно более затратны, чем конечно-разностные, поскольку имеет место кубический рост числа операций по мере повышения разрешения. В спектральных моделях не сохраняются точно масса или энергия. Разрешение нелинейных слагаемых уравнений для полностью спектральных моделей делает процесс непомерно дорогим с вычислительной точки зрения. Локальные процессы, многие из которых разрывны (например, фазовые переходы влаги), можно представить только в физическом пространстве.

Последние две проблемы были решены путем развития псевдоспектральных методов (Taylor et al., 1997), в которых одни процессы рассматриваются в спектральном пространстве, а другие – в физическом или дискретном (сеточном) пространствах. Такой подход включает в себя преобразования между спектральным и физическим пространствами на каждом шаге по времени. В частности, после экстраполяции по времени с получением пространственных коэффициентов разложения, зависящие переменные преобразуются из спектрального пространства на соответствующую сетку, используя обратное преобразование.

В методе конечных элементов так же, как и в спектральном подходе, функции представляются в терминах базисных функций, однако область, в которой ищется решение дифференциальных уравнений, разбивается на конечное количество подобластей (элементов). В каждом из таких элементов произвольно выбирается вид аппроксимирующей функции (в простейшем случае, это – полином первой степени). Вне своего элемента аппроксимирующая функция равна нулю. Значения функций на границах элементов (узлах) является решением задачи и заранее неизвестно. Коэффициенты аппроксимирующих функций обычно ищутся из условия равенства соседних значений функций на границах между элементами (в узлах). Затем эти коэффициенты выражаются через значения функций в узлах элементов. Уравнения решаются в интегральной (слабой) постановке, приводящей к системе линейных алгебраических уравнений. Так как каждый из элементов связан с ограниченным количеством соседних, то система линейных алгебраических уравнений имеет разреженный вид, что существенно упрощает её решение (Зенкевич и Морган, 1986, Babuška et al., 2004).

Хотя метод конечных разностей и проще в реализации, и быстрее выполняется, но у метода конечных элементов есть свои преимущества, проявляющиеся в реальных задачах. Форма расчетной области может быть произвольной, а сетку удастся сделать более редкой в тех местах, где особая точность решения не нужна. Долгое время широкому распространению этого метода мешало отсутствие алгоритмов автоматического разбиения области на «почти равносторонние» треугольники (погрешность, в зависимости от вариации метода, обратно пропорциональна синусу или самого острого, или самого тупого угла в разбиении). Эту задачу удалось успешно решить с помощью алгоритмов, основанных на триангуляции Делоне (Скворцов, 2002).

Методы конечных элементов впервые были разработаны для инженерных приложений и затем адаптированы для использования в некоторых моделях геофизических процессов. Спектральный метод и метод конечных элементов тесно связаны между собой и построены на одной и той же идее. Основное различие между ними состоит в том, что спектральный метод приближает решение в виде линейной

комбинации непрерывных функций, которые обычно ненулевые во всей области решения, в то время как метод конечных элементов приближает решение в виде линейной комбинации локальных функций, которые отличны от нуля лишь на малых подобластях.

Оба эти метода являются особыми случаями метода Галёркина (Галёркин, 1915, Канторович и Крылов, 1962, Михлин, 1970), в котором зависимые переменные аппроксимируются конечной суммой пространственных базисных функций с зависящими от времени коэффициентами. Метод Галёркина представляет собой общий метод приближенного решения краевых задач для дифференциальных уравнений в слабой постановке. Первый шаг в реализации этого метода состоит в выборе базисных функций, которые удовлетворяют граничным условиям и в пределе бесконечного количества элементов базиса образуют полную систему. Конкретный вид функций определяется спецификой задачи и удобством реализации. Решение представляется в виде разложения по базису, вычисляется невязка приближенного решения и затем налагается условие ортогональности невязки к базисным функциям. Отсюда получается однородная система уравнений для коэффициентов разложения, позволяющая приближенно найти решения задачи.

В методе конечных объемов пространство делится на элементарные объемы и вычисляются изменения прогностических величин внутри каждого из них, рассматривая поток жидкости или газа через поверхности объема. Для любой величины в каждой точке пространства, окруженной некоторым замкнутым конечным объемом, ее общее количество может изменяться за счет следующих факторов: перенос через поверхность, ограничивающую контрольный объем (поток) и генерация (или уничтожение) некоторого количества величины внутри данного объема (источники или стоки). Другими словами, при формулировке метода конечных объемов используется физическая интерпретация исследуемой величины (Eymard, 2000). Модификацией этого метода является метод Годунова – реализация схемы сквозного счета, с помощью которой можно рассчитывать газодинамические течения с разрывами параметров внутри расчетной области. Потоки через боковые грани определяются из решения задачи о распаде произвольного разрыва (Годунов и др., 1976).

Методы декомпозиции области основаны на разделении исходной области на подобласти и решении краевых задач на них с последующими итерациями решения между подобластями (Toselli and Widlund, 2004). Многосеточный метод базируется на использовании последовательности уменьшающихся сеток и операторов перехода от одной сетки к другой. Сетки строятся на основе больших значений в матрице системы, что позволяет использовать этот метод при решении эллиптических уравнений даже на нерегулярных сетках (Бахвалов и др., 2003).

Особую сложность в построение численных методов для моделей геофизических течений представляет проблема решения уравнения переноса (адвекции). Характерной чертой уравнений гиперболического типа, к которому относится и уравнение переноса, является возможность появления разрывных решений, в нелинейном случае – даже при гладких (в том числе аналитических) краевых условиях. Источниками разрывов могут быть разрывные функции начальных или граничных условий, или несогласованность этих условий. Важный класс для таких уравнений составляют монотонные разностные схемы, переводящие монотонный профиль решения на предыдущем временном шаге в монотонный профиль на следующем. Наиболее сильные различия в численных решениях при расчетах по монотонным и немонотонным схемам проявляются на грубых пространственных сетках и при больших временах расчета. Существуют различные критерии монотонности разностных схем и способы регуляризации (монотонизации) разрывных численных решений, начало которым положено введением искусственной вязкости (Самарский, 1967). Для уравнений и систем гиперболического типа понятие о таких схемах впервые введено в работе (Friedrichs and Hyers, 1954).

В последнее время большинство спектральных и конечно-разностных моделей численного прогноза погоды применяют сеточный полулагранжев метод для описания адвекции (Temperton and Staniforth, 1987). Предшественник этого метода – обратный метод характеристик – хорошо известен в вычислительной газовой динамике и метеорологии с начала 60-х годов прошлого века (см. Lele, 1992). Однако обратный метод характеристик и его разновидности, как правило, применялись только при числах Куранта меньше единицы и имели максимально второй порядок аппроксимации. Сущность полулагранжева метода состоит в дискретизации уравнения переноса вдоль траекторий, представляющей собой комбинацию разностного дифференцирования по пространству и времени. Для каждого узла сетки ищется точка, из которой исходит траектория частицы на предыдущем шаге по времени, и значение из этой точки переносится в рассматриваемый узел. Этот метод устраняет ограничение величины шага по времени условием Куранта, особенно жесткое вблизи полюсов вследствие сходимости меридианов, и дает возможность использовать большие шаги по времени. На основе этого подхода в Институте вычислительной математики РАН разработана глобальная полулагранжева модель численного прогноза погоды (Толстых, 2010), внедренная в оперативную практику Гидрометцентра России. Повышение шага по времени (в 3–5 раз) позволяет при заданном разрешении модели ускорить расчет, либо при заданном времени прогноза повысить горизонтальное разрешение. Такое повышение шага по времени не нарушает аппроксимации, так как ограничение по числу Куранта в атмосфере проявляется, в основном, при расчете достаточно гладких струйных течений в верхней тропосфере.

Конечные точки траекторий всегда являются точками сетки, в то время как исходные точки чаще всего не совпадают с сеточными узлами. Значения переменных в исходных точках получаются интерполяцией с использованием значений в близлежащих точках сетки. Если в полулагранжевом методе применить линейную интерполяцию для нахождения значений функции в исходной точке траектории, то при модуле числа Куранта меньше единицы этот метод эквивалентен классической схеме направленных разностей. Современные полулагранжевы схемы, как правило, используют кубическую интерполяцию для нахождения значений функции в исходной точке траектории. По сравнению с эйлеровыми конечно-разностными схемами второго порядка, полулагранжев метод дает значительно меньшую фазовую ошибку в решении, а по сравнению со спектральным методом – позволяет избежать эффекта Гиббса. В то же время, в полулагранжевом методе формально отсутствует свойство сохранения нормы переносимой величины, теоретически необходимое для интегрирования модели на длительные (несколько десятилетий и больше) сроки.

3.2. Некоторые вычислительные аспекты моделирования климатических процессов

Уравнения мелкой воды. Оценки характерного масштаба вертикальных движений и отношения вертикального масштаба к радиусу земли a ($H/a \sim 10^{-4}$ для атмосферы, $H/a \sim 10^{-5}$ для океана) позволяет формально считать атмосферу и океан тонкими пленками, но с учетом рельефа $z_s(x, y)$ – переменной толщины. Ограничиваясь лишь тропосферой, во внимание следует также принять наличие свободной поверхности $z_t(x, y, t)$ – высоты тропопаузы. В баротропном приближении квазидвумерной жидкости постоянной плотности ρ_0 уравнения движения (1.3.22) в форме Эйлера могут быть записаны в декартовой системе координат следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x}, \\
\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y}, \\
\frac{\partial p}{\partial z} &= -g\rho_0, \\
\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0.
\end{aligned} \tag{3.2.1}$$

Интегрируя последнее из уравнений системы (3.2.1) по высоте слоя $H(x, y, t) = z_t(x, y, t) - z_s(x, y)$ с учетом того, что

$$w = 0 \quad \text{при } z = z_s, \quad w = \frac{dH}{dt} \quad \text{при } z = z_t, \tag{3.2.2}$$

уравнение сохранения массы можно записать в виде

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial Hu}{\partial x} + \frac{\partial Hv}{\partial y} = 0. \tag{3.2.3}$$

Из третьего уравнения системы (3.2.1) следует, что

$$p = p_t + g\rho_0(H - z + z_s),$$

где p_t - давление при $z = z_t$. Если рассмотреть случай, для которого $p_t = \text{const}$, то первые два уравнения движения можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv &= -g \frac{\partial(H + z_s)}{\partial x}, \\
\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu &= -g \frac{\partial(H + z_s)}{\partial y}.
\end{aligned} \tag{3.2.4}$$

Уравнения (3.2.3) и (3.2.4) называются уравнениями мелкой воды для вращающейся жидкости, которые при условии $f = 0$ превращаются в классические уравнения теории мелкой воды. Взяв операцию вихря для уравнений (3.2.4), можно получить уравнение для потенциального вихря $\Omega_p = \Omega_z / (H + z_s)$:

$$\frac{d\Omega_p}{dt} \equiv \frac{\partial \Omega_p}{\partial t} + u \frac{\partial \Omega_p}{\partial x} + v \frac{\partial \Omega_p}{\partial y} = 0, \tag{3.2.5}$$

где $\Omega_z = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} + f = \xi + f$ – полная завихренность, а $\zeta = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$ – относительная завихренность. В приближении так называемой β -плоскости: $f = f_0 + \beta y$, $\beta = \frac{\partial f}{\partial y}$, где f_0 – «опорное» значение параметра Кориолиса.

Как отмечалось выше, характерные крупномасштабные движения можно получить, рассматривая их в качестве отклонений от геострофического баланса (1.5.3). Уравнения (1.5.3) в приближении мелкой воды можно записать в следующем виде:

$$u = -\frac{g}{f_0} \frac{\partial h}{\partial y}, \quad v = \frac{g}{f_0} \frac{\partial h}{\partial x},$$

где $h(x, y, t) = H(x, y, t) + z_s(x, y) - H_0$, а H_0 – некоторое среднее значение $H + z_s$. Из этих соотношений получается следующая оценка для h :

$$\frac{h}{H_0} \sim \frac{f_0 UL}{gH_0} = \text{Ro} \left(\frac{L}{L_0} \right)^2, \quad L_0 = \frac{\sqrt{gH_0}}{f_0}, \quad (3.2.6)$$

где L_0 – радиус Россби-Обухова, Ro – число Кибеля-Россби (см. формулу (1.5.1) главы 1). Отсюда видно, что малость числа Ro влечет такого же порядка малость отношения h/H_0 , если масштаб L характеризует глобальные процессы. Здесь важно отметить, что в отличие от классической теории мелкой воды, область применения мелководного приближения вращающейся жидкости не ограничена условием $H_0/L \ll 1$, поскольку в рассматриваемом случае двумерность движения есть следствие вращения, а не малости толщины слоя. Так как $\Omega_z/f \sim \text{Ro}$, то выражение для потенциального вихря переписывается в виде (Должанский, 2011)

$$\frac{H_0}{f_0} \Omega_p = \frac{H_0}{f_0} \left(\frac{\Omega_z + f}{H_0 + h} \right) = 1 + \frac{\Omega_z}{f_0} - \frac{h}{H_0} + O(\text{Ro}^2). \quad (3.2.7)$$

Вводя функцию тока $\psi = -\frac{gh}{f_0}$ из соотношений

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (3.2.8)$$

можно получить уравнение сохранения потенциального вихря теории вращающейся мелкой воды в квазигеострофическом приближении, впервые выведенное Чарни (Charney, 1948) и независимо Обуховым (1949):

$$\frac{d(f + \Delta \psi - L_0^{-2} \psi)}{dt} = 0. \quad (3.2.9)$$

Величина H_0 в простейшем случае задается как высота однородной атмосферы

$$H_0 = \frac{p_0}{g\rho_0}, \quad \text{где } p_0 \text{ – характерное значение } p_s.$$

Уравнение Обухова-Чарни (3.2.9) удовлетворяют ряду интегральных законов. Во-первых, имеет место соотношение:

$$\iint (\Delta \psi - L_0^{-2} \psi) dx dy = \text{const}, \quad (3.2.10)$$

означающее сохранение интегральной потенциальной завихренности:

$$\iint \psi dx dy = \text{const}. \quad (3.2.11)$$

Кроме того, выполняется закон сохранения полной энергии:

$$\frac{1}{2} \iint \left[(\nabla \psi)^2 + L_0^{-2} \psi^2 \right] dx dy = \text{const}, \quad (3.2.12)$$

причем первое слагаемое в подынтегральном выражении (3.2.12) означает вклад в этот баланс кинетической энергии жидкости, а второе – вклад ее потенциальной энергии.

Геострофическое и гидростатические приближения, использованные при выводе уравнения (3.2.9), фильтруют быстрые звуковые и гравитационные волны, являющиеся шумом для крупномасштабных движений. Целесообразно в связи с этим рассмотреть задачу о малых колебаниях вращающейся жидкости (Должанский, 2011). Линеаризованные относительно состояния покоя уравнения теории мелкой воды движения (3.2.3) и (3.2.4) записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - f_0 v &= -g \frac{\partial h}{\partial x}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + f_0 u &= -g \frac{\partial h}{\partial y}, \\ \frac{\partial h}{\partial t} + H_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

Эту систему удобно переформулировать как систему уравнений относительно Ω_z и h :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Omega_z - \frac{f_0}{H_0} h \right) &= 0, \\ \frac{\partial^2 h}{\partial t^2} + H_0 f_0 \Omega_z &= g H_0 \Delta h. \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

Движения, в которых $\Omega_z = f_0 h / H_0$, описываются телеграфным уравнением для h :

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} + f_0^2 h = g H_0 \Delta h \quad (3.2.15)$$

и представляют собой быстрые гравитационно-гироскопические волны. Если решение уравнения (3.2.15) отыскивать в виде $h(x, y, t) = h_0 e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)}$, где k_x и k_y –

соответствующие волновые числа по x и y , то можно получить следующее дисперсионное соотношение:

$$\omega^2 = f_0^2 + c^2 k^2, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad c = \sqrt{gH_0}. \quad (3.2.16)$$

Их групповая скорость

$$C_g = \frac{d\omega}{dk} = c \left[1 + \left(\frac{f_0}{kc_g} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.17)$$

уже при длине волны $L = 2\pi / k = 1500$ км практически совпадает с $c \approx 280$ м/с. На β -плоскости линеаризованное относительно потока со скоростью U приближение уравнения (3.2.9) записывается следующим образом:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U \frac{\partial}{\partial x} \right) (\Delta \psi - L_0^{-2}) + \beta \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \quad (3.2.18)$$

а его волновые решения (волны Россби) подчиняются дисперсионному соотношению

$$\omega = k_x \left(U - \frac{\beta}{k^2 + L_0^{-2}} \right). \quad (3.2.19)$$

Эти волны распространяются с фазовой скоростью

$$c_R = \frac{\omega}{k} = \frac{k_x}{k} \left(U - \frac{\beta}{k^2 + L_0^{-2}} \right), \quad (3.2.20)$$

которая по отношению к основному потоку тем больше, чем больше их длина и чем ближе рассматриваемая область к экватору. По сравнению с гравитационными волнами, волны Россби – медленные и их аппроксимация в численных моделях существенных проблем не вызывает. Компоненты групповой скорости волн Россби выражаются следующими соотношениями:

$$C_{Rx} = U + \frac{\beta(k_x^2 - k_y^2 - L_0^{-2})}{(k^2 + L_0^{-2})^2}, \quad C_{Ry} = \frac{2\beta k_x k_y}{(k^2 + L_0^{-2})^2},$$

которые в стационарном случае ($\omega = 0$) принимают вид

$$C_{Rx} = \frac{2k_x^2 U^2}{\beta}, \quad C_{Ry} = \frac{2k_x k_y U^2}{\beta}. \quad (3.2.21)$$

Из (3.2.21) следует, что групповая скорость стационарных баротропных волн Россби направлена на северо-восток.

Для описания волновых движений выше рассматривались баротропные уравнения, в которых давление зависело только от плотности, а уравнение притока тепла было исключено из рассмотрения. Исследования, посвященные проблеме низкочастотной

изменчивости атмосферных процессов и отклику атмосферной циркуляции на аномалии температуры поверхности океана, показали, что эти процессы связаны с реализацией баротропной неустойчивости – возбуждением в атмосфере двумерных баротропных квазистационарных волн Россби (Дымников, 2007). В бароклинных движениях давление зависит как от плотности, так и от температуры. Основным источником волн Россби является отклонение ветра от зонального геострофического распределения, что происходит при развитии так называемой бароклинной неустойчивости. Эта неустойчивость порождается меридиональным градиентом температуры, который имеет самую большую величину в средних широтах, что и определяет местоположение основного источника волн Россби в средних широтах, откуда они распространяются к югу и к северу. В отличие от рассмотренной выше баротропной волны Россби, бароклинные волны Россби имеют вертикальную структуру и существенно трехмерны, в то время как описанная выше баротропная динамика квазидумерна.

Проблема построения и исследования разностных схем с точки зрения описания волновых процессов и воспроизведения баротропной и бароклинной неустойчивости подробно рассмотрена в книге (Марчук и др., 1987). Следуя этой публикации, в качестве примера, ниже рассматриваются аппроксимации фазовых и групповых скоростей гравитационных волн на сетках Аракавы A и C . Уравнения, описывающие такие волны, получаются из (3.2.13) пренебрежением силы Кориолиса и имеют следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} + c^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0, \quad (3.2.22)$$

где $\Phi = gh$. Соответствующее дисперсионное соотношение (3.2.16) сводится к $\omega^2 = c^2 k^2$, фазовая скорость распространения волн описывается формулой

$$c_{gx} = \frac{\omega}{k} k_x, \quad c_{gy} = \frac{\omega}{k} k_y, \quad (3.2.23)$$

а компоненты групповой скорости выражаются следующим образом:

$$C_{gx} = \frac{\partial \omega}{\partial k_x} = \pm \frac{ck_x}{k}, \quad C_{gy} = \frac{\partial \omega}{\partial k_y} = \pm \frac{ck_y}{k}. \quad (3.2.24)$$

Пусть теперь h есть шаг сетки. Если использовать симметричные аппроксимации производных второго порядка точности по h , то для сетки C , на которой значения Φ берутся в центре ячейки, значения u – на боковых сторонах по оси x , а значения v – на боковых сторонах по оси y , будет иметь место

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} \approx \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{h}. \quad (3.2.25)$$

Если дискретное решение Φ_i можно представить в виде ($\underline{i}$ – мнимая единица)

$$\Phi_i \propto e^{\underline{i}(k_x n h + k_y m h - \tilde{\omega} t)},$$

то

$$\frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{h} = i k_x \frac{\sin(k_x h / 2)}{k_x h / 2} \Phi_{i+1/2} . \quad (3.2.26)$$

Аппроксимируя (3.2.22) с помощью разностей (3.2.25) и используя представление (3.2.26), можно получить разностный аналог дисперсионного соотношения

$$\tilde{\omega}^2 = c^2 \frac{\sin^2(k_x d) + \sin^2(k_y d)}{d^2} ,$$

где $d = h / 2$. Для сетки A , на которой значения всех переменных рассчитываются в центре конечноразностной ячейки, дисперсионное соотношение имеет тот же самый вид, но с $d = h$. Отношение фазовых скоростей для дифференциальной и разностной задач имеет следующий вид:

$$\frac{\tilde{c}_g}{c_g} = \frac{\tilde{\omega}}{\omega} = \sqrt{\frac{\sin^2 \xi + \sin^2 \eta}{\xi^2 + \eta^2}} = f(\xi, \eta) ,$$

где $\xi = k_x d$, $\eta = k_y d$. Минимальная длина волны, разрешимая на сетке с шагом h , есть $\lambda_{\min} = 2h$, а максимальное волновое число, соответственно, $k_{\max} = \pi / h$. Таким образом, поскольку

$$f(0, 0) = 1, \quad f(0, \pi) = f(\pi, 0) = 0, \quad f(\pi / 2, \pi / 2) = 2 / \pi ,$$

то $\xi, \eta \in [0, \Pi] \times [0, \Pi]$, где $\Pi = \pi / 2$ для сетки C и $\Pi = \pi$ - для сетки A . Это означает, что с точки зрения минимизации ошибок фазовой скорости сетка C предпочтительнее сетки A .

Динамика баротропной жидкости. В случае чисто двумерного приближения уравнения (3.2.1) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + f v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} - f u, \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0. \end{aligned} \quad (3.2.27)$$

Предполагается, что движение происходит в канале на β -плоскости с условиями периодичности по x :

$$\varphi(x, y, t) = \varphi(x + L, y, t), \quad \varphi = u, v, p \quad (3.2.28)$$

и «прилипания» по y :

$$v = 0 \quad \text{при} \quad y = y_1 \quad \text{и} \quad y = y_2 . \quad (3.2.29)$$

Уравнение неразрывности допускает введение функции тока

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = \frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (3.2.30)$$

Дифференцируя первое и второе из уравнений (3.2.27), соответственно, по y и x , а затем вычитая получившиеся выражения друг из друга, можно получить следующее уравнение для абсолютного вихря Ω_z :

$$\frac{d\Omega_z}{dt} \equiv \frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + u \frac{\partial \Omega_z}{\partial x} + v \frac{\partial \Omega_z}{\partial y} = 0, \quad (3.2.31)$$

где по-прежнему

$$\Omega_z = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} + f \equiv \Delta \psi + f.$$

Уравнение (3.2.31) представляет собой локальный закон сохранения абсолютного вихря. Если $F(\Omega_z)$ есть произвольная дифференцируемая функция Ω_z , то из (3.2.31) следует соотношение $dF(\Omega_z)/dt = 0$, которое можно переписать в дивергентном виде:

$$\frac{\partial F(\Omega_z)}{\partial t} + \frac{\partial u F(\Omega_z)}{\partial x} + \frac{\partial v F(\Omega_z)}{\partial y} = 0. \quad (3.2.32)$$

В результате интегрирования этого уравнения по области $D: \{L \times (y_1, y_2)\}$ с учетом условий (3.2.28) и (3.2.29) можно получить следующий интегральный закон сохранения для абсолютного вихря:

$$\iint_D F(\Omega_z) dD = \text{const}. \quad (3.2.33)$$

Умножение первого уравнения системы (3.2.27) на u , второго – на v и сложение получившихся выражений приводит к уравнению для удельной (на единицу массы) энергии $E = (u^2 + v^2)/2$:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + u \frac{\partial E}{\partial x} + v \frac{\partial E}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_0} \left(u \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial p}{\partial y} \right),$$

интегрирование которого с учетом уравнения неразрывности дает закон сохранения энергии в системе:

$$\frac{1}{2} \iint_D (u^2 + v^2) dD = \text{const}.$$

Учитывая соотношения (3.2.30), эту формулу можно переписать следующим образом:

$$\iint_D |\nabla \psi|^2 dD = \text{const}. \quad (3.2.34)$$

Уравнение (3.2.31) можно также переписать в следующем виде:

$$\frac{\partial \Delta \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Delta \psi}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Delta \psi}{\partial x} + \beta \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0. \quad (3.2.35)$$

Умножение (3.2.35) на $\Delta \psi$ и интегрирование по области D с учетом краевых условий приводит к соотношению:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \iint_D (\Delta \psi)^2 dD + \beta \iint_D \frac{\partial \psi}{\partial x} \Delta \psi dD = 0.$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \iint_D \frac{\partial \psi}{\partial x} \Delta \psi dD &= \iint_D \frac{\partial \psi}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) dD = \\ &= \frac{1}{2} \iint_D \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right] dD = 0, \end{aligned}$$

то имеет место закон сохранения энтропии (квадрата относительной завихренности)

$$\iint_D (\Delta \psi)^2 dD = \text{const}. \quad (3.2.36)$$

Из соотношений (3.2.34) и (3.2.36) следует, что

$$\bar{k}^2 = \iint_D (\Delta \psi)^2 dD / \iint_D |\nabla \psi|^2 dD = \text{const}. \quad (3.2.37)$$

В книге (Марчук и др., 1987) показано, что величина $\bar{k}^2$ имеет смысл средне-взвешенного по энергии волнового числа, характеризующего решение задачи (3.2.35). Его инвариантность означает, что каскадные переходы энергии через нелинейные взаимодействия от больших масштабов к меньшим невозможны. Такое свойство двумерных движений приводит к тому, что спектральное распределение энергии в инерционном интервале (диапазоне длин волн между масштабом генерации и масштабом диссипации) подчиняется закону k^{-3} , а не $k^{-5/3}$ как в трехмерном случае. Выполнение интегрального закона сохранения энтропии наряду с сохранением энергии является фундаментальным аспектом разработки вычислительной технологии, связанной с моделированием климатических процессов.

Складывая уравнения (3.2.31) и (3.2.32) при $F(\Omega_z) = \Omega_z$, можно получить уравнение переноса вихря в полудивергентной (симметризованной) форме:

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(u \frac{\partial \Omega_z}{\partial x} + \frac{\partial u \Omega_z}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left(v \frac{\partial \Omega_z}{\partial y} + \frac{\partial v \Omega_z}{\partial y} \right) = 0. \quad (3.2.38)$$

В такой форме закон сохранения энтропии выполняется независимо от условия бездивергентности поля скорости. Умножение (3.2.38) на Ω_z и интегрирование по области D приводит к следующему соотношению:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_D \Omega_z^2 dD + \iint_D \left(u \Omega_z \frac{\partial \Omega_z}{\partial x} + \Omega_z \frac{\partial u \Omega_z}{\partial x} \right) dD + \iint_D \left(v \Omega_z \frac{\partial \Omega_z}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial v \Omega_z}{\partial y} \right) dD = 0.$$

В силу условий периодичности

$$\iint_D \left(u \Omega_z \frac{\partial \Omega_z}{\partial x} + \Omega_z \frac{\partial u \Omega_z}{\partial x} \right) dD = \iint_D \frac{\partial u \Omega_z^2}{\partial x} dD = 0,$$

а вследствие условий прилипания также

$$\iint_D \left(v \Omega_z \frac{\partial \Omega_z}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial v \Omega_z}{\partial y} \right) dD = \iint_D \frac{\partial v \Omega_z^2}{\partial y} dD = 0.$$

Это означает, что в полудивергентном виде нелинейный оператор переноса вихря представим в виде суммы двух операторов, каждый из которых удовлетворяет условию кососимметричности:

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + K_x \Omega_z + K_y \Omega_z = 0, \quad \iint_D \Omega_z K_s \Omega_z dD = 0 \quad (s = x, y).$$

Симметричные разностные аппроксимации операторов K_s приводят к конечномерным аналогам (кососимметричным матрицам), также обладающим свойством косо симметрии. Примером такой дискретизации является аппроксимация второго порядка точности:

$$\left(K_x^h \Omega_z^h \right)_h = \frac{1}{2} \left(u_i \frac{\Omega_{z,i+1} - \Omega_{z,i-1}}{2\Delta x} + \frac{u_{i+1} \Omega_{z,i+1} - u_{i-1} \Omega_{z,i-1}}{2\Delta x} \right) = \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{u_{i+1} + u_i}{2} \Omega_{z,i+1} - \frac{u_i + u_{i-1}}{2} \Omega_{z,i-1} \right).$$

Уравнение переноса вихря можно записать в следующих трех эквивалентных формах:

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + J_1(\psi, \Omega_z) = 0, \quad \frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + J_2(\psi, \Omega_z) = 0, \quad \frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + J_3(\psi, \Omega_z) = 0, \quad (3.2.39)$$

где

$$\begin{aligned} J_1(\psi, \Omega_z) &= \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega_z}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega_z}{\partial x}, \\ J_2(\psi, \Omega_z) &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\Omega_z \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Omega_z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right), \\ J_3(\psi, \Omega_z) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial \Omega_z}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\psi \frac{\partial \Omega_z}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (3.2.40)$$

Легко проверить, что справедливы следующие соотношения:

$$\iint_D J_2(\psi, \Omega_z) \psi dD = 0, \quad \iint_D J_2(\psi, \Omega_z) \Omega_z dD = 0. \quad (3.2.41)$$

Симметричные, второго порядка точности, разностные аппроксимации якобиана также сохраняют это свойство.

Уравнение (3.2.38) можно переписать в виде

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + \frac{1}{2} [J_1(\psi, \Omega_z) + J_2(\psi, \Omega_z)] = 0, \quad (3.2.42)$$

симметричные пространственные аппроксимации которого дают возможность построить дифференциально-разностную схему, обеспечивающую выполнение закона сохранения энтропии, т.е. $K_1^h = \frac{1}{2}(J_1^h + J_2^h)$ будет кососимметрической матрицей. Другая эквивалентная форма уравнения (3.2.38) выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} + \frac{1}{2} [J_1(\psi, \Omega_z) + J_3(\psi, \Omega_z)] = 0. \quad (3.2.43)$$

Симметричная разностная аппроксимация оператора $K_2 = \frac{1}{2}(J_1 + J_3)$ приводит к тому, что матрица $K_2^h = \frac{1}{2}(J_1^h + J_3^h)$ также будет кососимметрической. Можно показать (см. Марчук и др., 1987), что этот факт отражает закон сохранения энергии. Если теперь выбрать разностную аппроксимацию якобиана в виде

$$\frac{1}{3} [J_1^h(\psi^h, \Omega_z^h) + J_2^h(\psi^h, \Omega_z^h) + J_3^h(\psi^h, \Omega_z^h)] \equiv K^h(\psi^h, \Omega_z^h),$$

то уравнение

$$\frac{\partial \Omega_z^h}{\partial t} + K^h(\psi^h, \Omega_z^h) = 0 \quad (3.2.44)$$

будет обладать двумя квадратичными законами сохранения (Arakawa, 1966). Важно отметить, что при решении уравнения (3.2.44) с помощью схемы Кранка-Николсон точные аналоги законов сохранения выполняются не только при разностной аппроксимации по пространству, но и по времени.

Гидродинамическая неустойчивость и турбулентность. Ламинарные течения можно описать с помощью уравнений типа Навье-Стокса, предельным стационарным случаем которых является формулировка: нелинейности малы и ими можно пренебречь, а поток определяется балансом между внешними силами и диссипацией. Соответствующее поле скорости полностью предсказуемо и обладает теми же свойствами регулярности, что и внешние силы. По мере того, как число Рейнольдса растет и переходит через критическое значение, нелинейностями пренебречь уже нельзя и в системе происходит бифуркация – возникают совершенно другие решения, в которых проявляются нарушения симметрии начального потока. Так, например, стационарное течение, обусловленное независимыми во времени вынуждающими силами, становится периодическим во времени. Как правило, состояние потока после первой бифуркации все еще вполне регулярно. При дальнейшем возрастании числа Рейнольдса это течение также становится неустойчивым, приводя к очередному «сбою» симметрий. Каскад бифуркаций продолжается до тех пор, пока глобальная динамика течения не становится чрезвычайно

сложной, т.е. турбулентной. Переход от простого поведения к сложному в моделях часто рассматривается с помощью дискретных отображений (Frisch, 1995, Кузнецов, 2001), позволяющие исследовать процесс наступления хаоса в простых детерминированных системах и понять, как могут проявляться нерегулярные и стохастические решения в течениях жидкости.

В качестве примера, целесообразно рассмотреть неустойчивость гидродинамических течений, которая может создаваться сдвигом их скорости. Классической задачей является, например, вопрос об устойчивости (Монин, 1986) плоскопараллельного стационарного течения несжимаемой идеальной ($\nu = 0$) жидкости, направленного вдоль оси x и имеющего скорость $\vec{u}_0 = \{U(z), 0, 0\}$. Линеаризованные уравнения гидродинамики (1.5.30) можно записать в этом случае в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + U \frac{\partial \vec{u}'}{\partial x} + w \frac{\partial \vec{u}_0}{\partial z} &= -\nabla \pi', \\ \nabla \cdot \vec{u}' &= 0, \end{aligned} \quad (3.2.45)$$

где штрихами обозначены возмущения соответствующих гидродинамических величин. Используя эти уравнения, можно получить следующее уравнение для плотности кинетической энергии возмущений $K = \rho_0 |\vec{u}'|^2 / 2$:

$$\frac{\partial K}{\partial t} + \frac{\partial UK}{\partial x} + \rho_0 u' w' \frac{\partial U}{\partial z} + \nabla \cdot \rho_0 \pi' \vec{u}' = 0. \quad (3.2.46)$$

Если течение происходит в слое между твердыми горизонтальными стенками, на которых имеет место условие непротекания ($w = 0$), а по горизонтали возмущения затухают на бесконечности, то интегрирование (3.2.46) по всей области V определения решения приводит к соотношению

$$\frac{\partial}{\partial t} \int K dV = - \int \rho_0 u' w' \frac{\partial U}{\partial z} dV, \quad (3.2.47)$$

так что кинетическая энергия возмущений может меняться со временем вследствие работы напряжений $-\rho_0 u' w'$ на градиенте равновесной скорости $\partial U / \partial z$. В случае лишь двумерных возмущений, удовлетворяющих уравнению неразрывности

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0, \quad (3.2.48)$$

можно ввести функцию тока ψ , удовлетворяющую соотношениям

$$u' = -\frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad w' = \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (3.2.49)$$

и переписать первое из уравнений (3.2.45) в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U \frac{\partial}{\partial x} \right) \Delta \psi - \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0. \quad (3.2.50)$$

Если искать волновые решения этого уравнения в виде

$$\psi = \psi_0(z)e^{i(kx - \omega t)},$$

где k – волновое число, а ω – частота, то для комплексной амплитуды $\psi_0(z)$ можно получить так называемое уравнение Рэлея

$$(U - c) \left(\frac{\partial^2 \psi_0}{\partial z^2} - k^2 \psi_0 \right) - \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \psi_0 = 0, \quad (3.2.51)$$

где $c = \omega / k$ – фазовая скорость. В случае вязкой жидкости уравнение (3.2.50) принимает вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U \frac{\partial}{\partial x} \right) \Delta \psi - \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \nu \Delta^2 \psi, \quad (3.2.52)$$

а (3.2.51) становится уравнением Орра-Зоммерфельда

$$(U - c) \left(\frac{\partial^2 \psi_0}{\partial z^2} - k^2 \psi_0 \right) - \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \psi_0 = -\frac{i\nu}{k} \left(\frac{\partial^4 \psi_0}{\partial z^4} - 2k^2 \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial z^2} + k^4 \psi_0 \right). \quad (3.2.53)$$

Краевые условия для уравнения (3.2.51) заключаются в обращении в ноль значений ψ_0 на границах потока, а для (3.2.53) – наряду с этим еще и обращения в ноль на тех же границах значений $\partial \psi_0 / \partial z$.

Уравнения Рэлея и Орра-Зоммерфельда являются однородными и потому будут иметь нетривиальные решения лишь при некоторых значениях параметра c . Эти собственные значения задачи в общем случае будут комплексными числами $c = c_r + i c_i$, зависящими от волнового числа k , скорости U и вязкости ν , т.е. от числа Рейнольдса Re . С действительной частью c_r связана скорость распространения волны, а мнимая часть c_i характеризует изменения амплитуды волны со временем, которые описываются множителем $e^{kc_i t}$. При $c_i < 0$ амплитуда будет затухать, при $c_i = 0$ – оставаться неизменной (нейтральная волна), а при $c_i > 0$ – расти со временем. Можно таким образом определить критическое число Рейнольдса Re_{cr} как то значение Re , при котором впервые $c_i(k, Re) = 0$ хотя бы при одном k .

Подробное изложение вопросов, связанных с исследованием гидродинамической неустойчивости, содержится в обзоре Мони́на (1986). Анализ разностных схем с точки зрения воспроизведения гидродинамической неустойчивости и перехода к турбулентности может быть проведен с помощью подходов, детально описанных на примере бароклиной неустойчивости в книге (Марчук и др., 1987). Вычислительные аспекты моделирования турбулентности представлены также в книгах (Sagaut, 2006, Sagaut et al., 2006).

3.3. Пример построения вычислительной технологии для моделирования локальной циркуляции

Для иллюстрации описанных выше подходов к построению вычислительной технологии моделирования геофизических процессов в данном разделе будет рассмотрена

задача о локальной циркуляции в атмосфере, обусловленной термическими неоднородностями подстилающей поверхности. Для простоты дальнейших выкладок задача формулируется в двумерном приближении. Основные уравнения при этом являются модификацией уравнений гидротермодинамики атмосферы в приближении Буссинеска (1.5.30) и в пренебрежении вращением Земли:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{\partial \pi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{\partial \pi}{\partial z} + \lambda \theta + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial w}{\partial x}, \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -S\theta + \frac{\partial}{\partial z} \nu_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x}.\end{aligned}\tag{3.3.1}$$

Здесь θ – отклонение потенциальной температуры от ее фонового распределения $\Theta(z)$, причем $S = d\Theta/dz > 0$, $\lambda = g/\theta_0$ – параметр плавучести, ν и μ – коэффициенты вертикальной и горизонтальной турбулентной вязкости, ν_{θ} и μ_{θ} – коэффициенты вертикальной и горизонтальной турбулентной диффузии для температуры. Предполагается, что коэффициенты турбулентности известны, например, получены с помощью той или иной процедуры замыкания. С учетом уравнения неразрывности оператор

$$L\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + w \frac{\partial \varphi}{\partial z}\tag{3.3.2}$$

может быть записан как в симметризованной форме

$$L\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + w \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial w \varphi}{\partial z} \right),\tag{3.3.3}$$

так и в полностью дивергентной форме

$$L\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial w \varphi}{\partial z}.\tag{3.3.4}$$

Поскольку рассматривается локальный процесс (например, циркуляция, обусловленная городским «островом тепла»), то в качестве краевых условий для уравнений (3.3.1) целесообразно выбрать следующие формулировки:

$$\begin{aligned}u \rightarrow 0, w \rightarrow 0, \theta \rightarrow 0 &\quad \text{при } x \rightarrow \pm\infty, \\ u \rightarrow 0, w \rightarrow 0, \theta \rightarrow 0 &\quad \text{при } z \rightarrow \infty, \\ u = w = 0, \theta = \theta_0(x, t) &\quad \text{при } z = 0,\end{aligned}\tag{3.3.5}$$

где $\theta_0(x, t)$ достаточно быстро стремится к нулю при $x \rightarrow \pm\infty$. Начальные условия определяются спецификой конкретной задачи и требуют задания в начальный момент полей компонент скорости ветра и отклонений температуры от фонового распределения.

Уравнение Пуассона. Если продифференцировать первое из уравнений (3.3.1) по x , второе – по z и получившиеся выражения сложить, то в силу третьего уравнения (уравнения неразрывности) будем иметь место следующее уравнение Пуассона для зависимой переменной π :

$$\Delta\pi = F, \quad (3.3.6)$$

где

$$F = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial u}{\partial z} - w \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial w}{\partial x} - u \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial w}{\partial z} - w \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \theta \right).$$

В качестве краевых условий для этого уравнения можно выбрать, например, следующие:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \pi}{\partial x} &\rightarrow 0 && \text{при } x \rightarrow \pm\infty \\ \pi &\rightarrow 0 && \text{при } z \rightarrow \infty, \\ \frac{\partial \pi}{\partial z} &= \lambda \theta_0(x, t) && \text{при } z = 0. \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

Законы сохранения. Можно ввести кинетическую энергию $K = \frac{1}{2}(u^2 + w^2)$ и доступную потенциальную энергию $P = \frac{1}{2} \frac{\lambda \theta^2}{S}$. Если умножить первое уравнение движения на u , второе – на w и затем получившиеся выражения сложить, то получится уравнение для кинетической энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial K}{\partial t} + \frac{\partial uK}{\partial x} + \frac{\partial wK}{\partial z} &= -\frac{\partial u\pi}{\partial x} - \frac{\partial w\pi}{\partial z} + \lambda w\theta + \\ &+ u \left(\frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + w \left(\frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

Далее, если умножить последнее уравнение системы (3.3.1) на $\lambda \theta / S$, то будет иметь место уравнение для доступной потенциальной энергии:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial uP}{\partial x} + \frac{\partial wP}{\partial z} = -\lambda w\theta + \frac{\lambda \theta}{S} \left(\frac{\partial}{\partial z} v_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \right). \quad (3.3.9)$$

При выводе уравнений (3.3.8) и (3.3.9) использовано уравнение неразрывности $\partial u / \partial x + \partial w / \partial z = 0$. Из этих уравнений видно, что положительный вертикальный поток тепла $w\theta$ (в условиях, например, конвекции) приводит к росту кинетической энергии и уменьшению доступной потенциальной энергии. Можно записать уравнение для полной энергии $E = K + P$ в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial uE}{\partial x} + \frac{\partial wE}{\partial z} &= -\frac{\partial u\pi}{\partial x} - \frac{\partial w\pi}{\partial z} + \\ &+ u \left(\frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + w \left(\frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\lambda \theta}{S} \left(\frac{\partial}{\partial z} v_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \mu_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

Если пренебречь турбулентными слагаемыми (считать $\nu = \nu_\theta = \mu = \mu_\theta = 0$), то интегрирование уравнения для полной энергии по всей области (x, z) приводит к следующему интегральному соотношению:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} E dz dx = 0, \quad (3.3.11)$$

что означает закон сохранения полной энергии: $\bar{E} = \bar{E}(t=0)$, где черта сверху относится к операции интегрирования по всей области определения.

Если проинтегрировать уравнение неразрывности по z от 0 до ∞ и воспользоваться краевыми условиями для w , получится $\frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\infty} u dz = 0$ и, следовательно, если при $x \rightarrow \infty$ или при $x \rightarrow -\infty$ скорость $u \rightarrow 0$, то имеет место следующий аналог закона сохранения массы:

$$\int_0^{\infty} u dz = 0. \quad (3.3.12)$$

В частности, это означает, что профиль горизонтальной компоненты скорости имеет S-образный вертикальный профиль в каждом из вертикальных сечений.

Сетка. Область определения $(-\infty < x < \infty, 0 \leq z < \infty)$ заменяется расчетной областью конечной площади $(-L \leq x \leq L, 0 \leq z \leq H)$. Вводится равномерная конечно-разностная сетка по x и z с шагами Δx и Δz , соответственно. Основное условие при выборе распределения сеточных функций по вертикали представляет собой требование сохранения квадратичных функционалов для всех переносимых вдоль z субстанций в случае невязкой жидкости. Поскольку в качестве граничных условий по z принимается $w=0$ на верхней и нижней границах расчетной области, то уровни определения w должны быть сдвинуты на полшага Δz по отношению к другим зависимым переменным. Сеточные функции u, θ, π определяются на уровнях с целым значением $k=1, 2, \dots, K$, а функция w – на уровнях с дробным значением индекса k . Аналогичным образом, сеточные функции w, θ, π сдвинуты на полшага Δx по x и определяются в «целых» точках $i=1, 2, \dots, I$, в то время как функция u – в точках с дробным значением индекса i (C-сетка Аракавы).

Разностные аналоги уравнений. Уравнение неразрывности аппроксимируется следующим образом:

$$\frac{u_{i+1/2,k} - u_{i-1/2,k}}{\Delta x} + \frac{w_{i,k+1/2} - w_{i,k-1/2}}{\Delta z} = 0 \quad (3.3.13)$$

и непосредственными вычислениями можно убедиться, что

$$\sum_{k=1}^K \frac{u_{i+1/2,k} - u_{i-1/2,k}}{\Delta x} \Delta z = 0,$$

а поскольку $\sum_{k=1}^K u_{1/2,k} \Delta z = 0$, то $\sum_{k=1}^K u_{i+1/2,k} \Delta z = 0$ для всех i .

Прогностические уравнения системы (3.3.1) можно формально записать в виде

$$\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} + L\vec{\phi} + A_1\vec{\phi} = A_2\vec{\phi} + F^h\vec{\phi} + F^v\vec{\phi},$$

где $\phi = (u, v, \theta)$, оператор L отвечает за горизонтальную и вертикальную адвекцию, A_1 и A_2 представляют задачу адаптации за счет внутренних гравитационных волн и градиента давления, соответственно, F^h описывает горизонтальную диффузию, а F^v – вертикальный турбулентный перенос. Ниже рассматривается аппроксимация этих задач как этапов расщепления по физическим процессам.

Пусть $L\theta = \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial u \theta}{\partial x} + \frac{\partial w \theta}{\partial z}$, тогда дифференциальная задача $L\theta = 0$ с нулевыми значениями нормальной составляющей скорости на границах расчетной области D обладает двумя инвариантами:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_D \theta dD = 0, \quad \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \iint_D \theta^2 dD = 0. \quad (3.3.14)$$

Конечно-разностный аналог оператора $L\theta$ можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} (L_h \theta^h)_{i,k} &= \frac{\partial \theta_{i,k}}{\partial t} + \\ &+ \frac{1}{\Delta x} \left(u_{i+1/2,k} \frac{\theta_{i+1,k} + \theta_{i,k}}{2} - u_{i-1/2,k} \frac{\theta_{i,k} + \theta_{i-1,k}}{2} \right) + \\ &+ \frac{1}{\Delta z} \left(w_{i,k+1/2} \frac{\theta_{i,k+1} + \theta_{i,k}}{2} - w_{i,k-1/2} \frac{\theta_{i,k} + \theta_{i,k-1}}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

Легко убедиться, что в задаче $L_h \theta^h = 0$ с нулевыми значениями нормальной составляющей скорости на границах расчетной области D сохраняется величина $\sum_{i,k} \theta_{i,k} \Delta x \Delta z = 0$.

Выражение для $L_h \theta^h$ можно преобразовать к следующему виду:

$$\begin{aligned} (L_h \theta^h)_{i,k} &= \frac{\partial \theta_{i,k}}{\partial t} + \\ &+ \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1/2,k} \theta_{i+1,k} - u_{i-1/2,k} \theta_{i-1,k}) + \frac{1}{2\Delta z} (w_{i,k+1/2} \theta_{i,k+1} - w_{i,k-1/2} \theta_{i,k-1}) + \\ &+ \frac{1}{2} \theta_{i,k} \left(\frac{u_{i+1/2,k} - u_{i-1/2,k}}{\Delta x} + \frac{w_{i,k+1/2} - w_{i,k-1/2}}{\Delta z} \right) \equiv \\ &\equiv \frac{\partial \theta_{i,k}}{\partial t} + (K_t \theta)_{i,k}, \end{aligned} \quad (3.3.16)$$

где

$$(K_t \theta)_{i,k} = \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1/2,k} \theta_{i+1,k} - u_{i-1/2,k} \theta_{i-1,k}) + \frac{1}{2\Delta z} (w_{i,k+1/2} \theta_{i,k+1} - w_{i,k-1/2} \theta_{i,k-1}).$$

Если в пространстве сеточных функций ввести скалярное произведение вида

$$(\varphi, \psi) = \sum_{i,k} \varphi_{i,k} \psi_{i,k} \Delta x \Delta z,$$

то можно показать (Марчук, 1980), что так введенное скалярное произведение дает соотношение $(K_t \varphi, \psi) = 0$, т.е. оператор K_t является кососимметрическим. Таким образом, в задаче $L_h \theta^h = 0$ выполняется соотношение

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta, \theta) = 0,$$

т.е. сохраняется квадратичный функционал.

Если $L\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial w \varphi}{\partial z}$, где $\varphi = (u, w)$, то соответствующая конечно-разностная форма уравнения $L\varphi = 0$ может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} (L_h u^h)_{i+1/2,k} &= \frac{\partial u_{i+1/2,k}}{\partial t} + \\ &+ \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1,k} u_{i+3/2,k} - u_{i,k} u_{i-1/2,k}) + \frac{1}{2\Delta z} (w_{i+1/2,k+1/2} u_{i+1/2,k+1} - w_{i+1/2,k-1/2} u_{i+1/2,k-1}) + \\ &+ \frac{1}{2} u_{i+1/2,k} \left(\frac{u_{i+1,k} - u_{i,k}}{\Delta x} + \frac{w_{i+1/2,k+1/2} - w_{i+1/2,k-1/2}}{\Delta z} \right), \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

$$\begin{aligned} (L_h w^h)_{i,k+1/2} &= \frac{\partial w_{i,k+1/2}}{\partial t} + \\ &+ \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1/2,k+1/2} w_{i+1,k+1/2} - u_{i-1/2,k+1/2} w_{i-1,k+1/2}) + \frac{1}{2\Delta z} (w_{i,k+1} w_{i,k+3/2} - w_{i,k} w_{i,k-1/2}) + \\ &+ \frac{1}{2} w_{i,k+1/2} \left(\frac{u_{i+1/2,k+1/2} - u_{i-1/2,k+1/2}}{\Delta x} + \frac{w_{i,k+1} - w_{i,k}}{\Delta z} \right). \end{aligned} \quad (3.3.18)$$

Если принять $u_{i,k} = \frac{1}{2}(u_{i+1/2,k} + u_{i-1/2,k})$, $w_{i,k} = \frac{1}{2}(w_{i,k+1/2} + w_{i,k-1/2})$, $u_{i+1/2,k+1/2} = \frac{1}{2}(u_{i+1/2,k+1} + u_{i+1/2,k})$

и $w_{i+1/2,k+1/2} = \frac{1}{2}(w_{i+1,k+1/2} + w_{i,k+1/2})$, то в силу уравнения неразрывности выражения в скобках на последних строчках для $L_h u^h$ и $L_h w^h$ обратятся в нуль и задача снова сведется к задаче с кососимметрическим оператором. Отсюда следует, что в задаче $L_h \varphi^h = 0$ сохраняются величины $\sum_{i,k} \frac{1}{2} u_{i+1/2,k}^2 \Delta x \Delta z$ и $\sum_{i,k} \frac{1}{2} w_{i,k+1/2}^2 \Delta x \Delta z$.

Конечно-разностная аппроксимация для составляющих градиента функции π записывается следующим образом:

$$-\left(\frac{\partial \pi}{\partial x}\right)_{i+1/2,k} = -\frac{\pi_{i+1,k} - \pi_{i,k}}{\Delta x}, \quad -\left(\frac{\partial \pi}{\partial z}\right)_{i,k+1/2} = -\frac{\pi_{i,k+1} - \pi_{i,k}}{\Delta z}. \quad (3.3.19)$$

Оценить интегральный вклад градиента давления в генерацию кинетической энергии можно следующим образом. Если умножить первое из соотношений (20) на $u_{i+1/2,k}$ и просуммировать по всем i , то получится:

$$\begin{aligned} -\sum_i u_{i+1/2,k} \left(\frac{\partial \pi}{\partial x} \right)_{i+1/2,k} &= -\sum_i u_{i+1/2,k} \frac{\pi_{i+1,k} - \pi_{i,k}}{\Delta x} = -\sum_i u_{i+1/2,k} \frac{\pi_{i+1,k}}{\Delta x} + \sum_i u_{i+1/2,k} \frac{\pi_{i,k}}{\Delta x} \\ &= -\sum_i u_{i-1/2,k} \frac{\pi_{i,k}}{\Delta x} + \sum_i u_{i+1/2,k} \frac{\pi_{i,k}}{\Delta x} = \sum_i \pi_{i,k} \frac{u_{i+1/2,k} - u_{i-1/2,k}}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом показывается, что

$$-\sum_k w_{i,k+1/2} \left(\frac{\partial \pi}{\partial z} \right)_{i,k+1/2} = \sum_k \pi_{i,k} \frac{w_{i,k+1/2} - w_{i,k-1/2}}{\Delta z},$$

из чего, в силу уравнения неразрывности, следует:

$$-\sum_{i,k} \left[u_{i+1/2,k} \left(\frac{\partial \pi}{\partial x} \right)_{i+1/2,k} + w_{i,k+1/2} \left(\frac{\partial \pi}{\partial z} \right)_{i,k+1/2} \right] \Delta x \Delta z = 0. \quad (3.3.20)$$

В дифференциальной постановке в системе уравнений волновой адаптации

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \lambda \theta, \quad \frac{\lambda}{S} \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\lambda w \quad (3.3.21)$$

имеет место «поточечный» закон сохранения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} w^2 + \frac{1}{2} \frac{\lambda \theta^2}{S} \right) = 0.$$

Систему (3.3.21) можно свести к волновому уравнению:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N^2 w = 0, \quad (3.3.22)$$

где $N = \sqrt{\lambda S}$ - частота Вайсяля-Брента внутренних гравитационных волн. При характерных значениях $\lambda = 1/30 \text{ м}/(\text{с}^2 \text{ К})$ и $S = 3 \times 10^{-3} \text{ К}/\text{м}$, $N = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$. Это обстоятельство необходимо имеет в виду при выборе схемы по времени и шага Δt . Если выбрать конечно-разностную аппроксимацию задачи (3.3.21) в виде:

$$\frac{\partial w_{i,k+1/2}}{\partial t} = \lambda \frac{\theta_{i,k+1} + \theta_{i,k}}{2}, \quad \frac{\lambda}{S} \frac{\partial \theta_{i,k}}{\partial t} = -\lambda \frac{w_{i,k+1/2} + w_{i,k-1/2}}{2}, \quad (3.3.23)$$

умножить первое из этих уравнений на $w_{i,k+1/2}$, второе – на $\theta_{i,k}$ и сложить получившиеся выражения, то получится следующее соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} w_{i,k+1/2}^2 + \frac{1}{2} \frac{\lambda \theta_{i,k}^2}{S} \right) = \frac{\lambda}{2} (w_{i,k+1/2} \theta_{i,k+1} - w_{i,k-1/2} \theta_{i,k}).$$

Это означает, что поточечный закон сохранения выполняется лишь в случае, если поток $w\theta$ не зависит от высоты. В общем же случае, во всех вертикальных сечениях выполняется интегральный закон:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \left(\frac{1}{2} w_{i,k+1/2}^2 + \frac{1}{2} \frac{\lambda \theta_{i,k}^2}{S} \right) \Delta z = \frac{\lambda}{2} \sum_k (w_{i,k+1/2} \theta_{i,k+1} - w_{i,k-1/2} \theta_{i,k}) \Delta z = 0. \quad (3.3.24)$$

Если решение уравнения (3.3.23) искать в виде (индекс i для простоты записи опущен)

$$w_{k+1/2} = \hat{w}(t) e^{ik_z(k+1/2)\Delta z}, \quad \theta_k = \hat{\theta}(t) e^{ik_z k \Delta z},$$

то аналогом уравнения (3.3.22) будет следующее выражение

$$\frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial t^2} + \left(N \cos \frac{k_z \Delta z}{2} \right)^2 \hat{w} = 0. \quad (3.3.25)$$

Это означает, что изначально (в дифференциальной постановке) бездисперсионный пакет гравитационных волн (групповая скорость не зависит от волнового числа k , более того, равная в рассматриваемом случае нулю), в разностной аппроксимации становится диспергирующим с групповой скоростью

$$C_g = \pm N \frac{\Delta z}{2} \sin \frac{k_z \Delta z}{2}.$$

Для сетки A данная проблема отсутствует, поскольку как температура, так и вертикальная скорость, определены в одних и тех же узлах. Известно (Reinecke and Durran, 2009), что в современных моделях прогноза погоды высокого пространственного разрешения наблюдается тенденция завышать интенсивность вертикально распространяющихся орографических волн k , тем самым, увеличивать гравитационно-орографическое сопротивление. Таким образом, вопрос корректного воспроизведения внутренних гравитационных волн с помощью негидростатических моделей не является частной проблемой, а может определять качество таких моделей в целом.

Дифференциальное уравнение горизонтальной диффузии записывается следующим образом:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \mu_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \varphi \rightarrow 0 \quad \text{при } x \rightarrow \pm\infty. \quad (3.3.26)$$

Если умножить это уравнение на φ и проинтегрировать по x от $-\infty$ до $+\infty$, то с учетом условий на бесконечности будет иметь место следующее интегральное соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \varphi^2 dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \mu_\varphi \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 dx,$$

т.е. при положительном μ_φ соответствующий квадратичный функционал убывает со временем.

Пусть $\varphi = \theta$ или w . Конечно-разностная аппроксимация оператора горизонтальной диффузии или (для w) диссипации имеет следующий вид (для простоты записи вертикальный индекс k опущен):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} &= \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\mu_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_{i+1/2} - \left(\mu_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_{i-1/2} \right] = \\ &= \frac{(\mu_\varphi)_{i+1/2} \varphi_{i+1} - [(\mu_\varphi)_{i+1/2} + (\mu_\varphi)_{i-1/2}] \varphi_i + (\mu_\varphi)_{i-1/2} \varphi_{i-1}}{\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (3.3.27)$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_i \frac{1}{2} \varphi_i^2 \Delta x = - \sum_i (\mu_\varphi)_{i+1/2} \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{\Delta x} \right)^2 \Delta x.$$

Аналогичным образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{i+1/2}}{\partial t} &= \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i \right] = \\ &= \frac{\mu_{i+1} u_{i+3/2} - (\mu_{i+1} + \mu_i) u_{i+1/2} + \mu_i u_{i-1/2}}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

и

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_i \frac{1}{2} u_{i+1/2}^2 \Delta x = - \sum_i \mu_i \left(\frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{\Delta x} \right)^2 \Delta x.$$

Вертикальный турбулентный перенос в общем случае можно описать с помощью следующей задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} v_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \\ \alpha_1 v_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \alpha_2 \varphi &= F_\varphi \quad \text{при } z = 0, \\ \varphi &\rightarrow 0 \quad \text{при } z \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (3.3.28)$$

Если умножить это уравнение на φ и проинтегрировать по z от 0 до ∞ , то с учетом условия на бесконечности будет иметь место следующее интегральное соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\infty \frac{1}{2} \varphi^2 dz = - \int_0^\infty v_\varphi \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 dz - \left(\varphi \cdot v_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_{z=0},$$

т.е. при $F_\varphi = 0$, $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1$ или $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$, положительном v_φ соответствующий квадратичный функционал убывает со временем.

Пусть $\varphi = \theta$ или u . Конечно-разностная аппроксимация оператора вертикальной диффузии или диссипации (для u) имеет следующий вид (для простоты записи горизонтальный индекс i опущен):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} &= \frac{1}{\Delta z} \left[\left(v_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_{k+1/2} - \left(v_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_{k-1/2} \right] = \\ &= \frac{(v_\varphi)_{k+1/2} \varphi_k - [(v_\varphi)_{k+1/2} + (v_\varphi)_{k-1/2}] \varphi_k + (v_\varphi)_{k-1/2} \varphi_{k-1}}{\Delta z^2}. \end{aligned} \quad (3.3.29)$$

Если $\varphi = 0$ при $z = 0$, то отсюда следует, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \frac{1}{2} \varphi_k^2 \Delta z = - \sum_k (v_\varphi)_{k+1/2} \left(\frac{\varphi_{k+1} - \varphi_k}{\Delta z} \right)^2 \Delta z.$$

Аналогичным образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_{k+1/2}}{\partial t} &= \frac{1}{\Delta z} \left[\left(v \frac{\partial w}{\partial z} \right)_{k+1} - \left(v \frac{\partial w}{\partial z} \right)_k \right] = \\ &= \frac{v_{k+1} w_{k+3/2} - (v_{k+1} + v_k) w_{k+1/2} + v_k w_{k-1/2}}{\Delta z^2} \end{aligned} \quad (3.3.30)$$

и

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \frac{1}{2} w_{k+1/2}^2 \Delta z = - \sum_k v_k \left(\frac{w_{k+1/2} - w_{k-1/2}}{\Delta z} \right)^2 \Delta z.$$

Пусть уравнения движения аппроксимированы в соответствии с вышеприведенными соотношениями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{i+1/2,k}}{\partial t} &= - \frac{\pi_{i+1,k} - \pi_{i,k}}{\Delta x} + (F_u)_{i+1/2,k}, & \frac{\partial u_{i-1/2,k}}{\partial t} &= - \frac{\pi_{i,k} - \pi_{i-1,k}}{\Delta x} + (F_u)_{i-1/2,k}, \\ \frac{\partial w_{i,k+1/2}}{\partial t} &= - \frac{\pi_{i,k+1} - \pi_{i,k}}{\Delta z} + (F_w)_{i,k+1/2}, & \frac{\partial w_{i,k-1/2}}{\partial t} &= - \frac{\pi_{i,k} - \pi_{i,k-1}}{\Delta z} + (F_w)_{i,k-1/2}, \end{aligned} \quad (3.3.31)$$

где слагаемые (F_u, F_w) означают вклад в тенденцию u и w остальных, не выписанных здесь явно, слагаемых. Тогда аппроксимация уравнения Пуассона может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} &\frac{\pi_{i+1,k} - 2\pi_{i,k} + \pi_{i-1,k}}{\Delta x^2} + \frac{\pi_{i,k+1} - 2\pi_{i,k} + \pi_{i,k-1}}{\Delta z^2} = \\ &= - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u_{i+1/2,k} - u_{i-1/2,k}}{\Delta x} + \frac{w_{i,k+1/2} - w_{i,k-1/2}}{\Delta z} \right) + \\ &+ \frac{(F_u)_{i+1/2,k} - (F_u)_{i-1/2,k}}{\Delta x} + \frac{(F_w)_{i,k+1/2} - (F_w)_{i,k-1/2}}{\Delta z}. \end{aligned} \quad (3.3.32)$$

Схема по времени (метод расщепления). Свойство кососимметричности оператора $K = L + A_1 - A_2$, представляющего собой оператор исходной задачи за вычетом слагаемых турбулентного замыкания, позволяет использовать для решения конечно-разностной задачи метод расщепления, применяя в качестве базовой схему Кранка-Николсон. Пусть вектор $\phi = \{\phi_{ik}\}$ и

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + K\phi = 0,$$

тогда соответствующая схема может быть записана следующим образом ($n, \Delta t$ – индекс и шаг по времени):

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + K \frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} = 0. \quad (3.3.33)$$

Результатом умножения этого уравнения скалярно на $\frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2}$ является соотношение

$$(\phi^{n+1}, \phi^{n+1}) = (\phi^n, \phi^n), \quad (3.3.34)$$

означающее устойчивость вычислительного алгоритма в норме $\|\phi\|_2 = (\phi, \phi)^{1/2}$. Оператор K можно разделить на два оператора: $K = K_t + K_a$, где $K_t = L$ описывает процесс переноса субстанций вдоль траекторий, а $K_a = A_1 - A_2$ – адаптацию (с учетом градиента давления) метеорологических полей (расщепление динамического оператора K по физическим процессам). Каждый из этих операторов обладает свойством кососимметричности. Соответствующая схема расщепления имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1/2} - \phi^n}{\Delta t} + K_t \frac{\phi^{n+1/2} + \phi^n}{2} &= 0, \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^{n+1/2}}{\Delta t} + K_a \frac{\phi^{n+1} + \phi^{n+1/2}}{2} &= 0. \end{aligned} \quad (3.3.35)$$

Эта схема при условии коммутативности операторов K_t и K_a имеет второй порядок аппроксимации по времени. В общем случае схема имеет первый порядок аппроксимации, однако с помощью метода циклической перестановки можно и в общем случае построить схему второго порядка аппроксимации (Марчук, 1980). Поскольку K_t и K_a кососимметричны, то

$$(\phi^{n+1/2}, \phi^{n+1/2}) = (\phi^n, \phi^n), \quad (\phi^{n+1}, \phi^{n+1}) = (\phi^{n+1/2}, \phi^{n+1/2})$$

и, следовательно, $(\phi^{n+1}, \phi^{n+1}) = (\phi^n, \phi^n)$. Это означает, что имеет место выполнение квадратичных законов сохранения и абсолютная устойчивость схемы.

Оператор K_t представляет собой сумму двух кососимметрических операторов (перенос вдоль каждого геометрического направления). Действительно, если рассмотреть, например, задачу

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial t} + \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1/2,k} \phi_{i+1,k} - u_{i-1/2,k} \phi_{i-1,k}) = 0, \quad (3.3.36)$$

то нетрудно убедиться, что $\frac{\partial}{\partial t} \sum_i \phi_{i,k}^2 \Delta x = 0$ для всех k . Аналогичным образом, для задачи

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial t} + \frac{1}{2\Delta z} (w_{i,k+1/2} \phi_{i,k+1} - w_{i,k-1/2} \phi_{i,k-1}) = 0$$

выполняется соотношение $\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \phi_{i,k}^2 \Delta z = 0$ для всех i . Поэтому естественно произвести дальнейшее расщепление задачи (по пространственным переменным), которое, пренебрегая на время турбулентными слагаемыми, можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1/4} - \phi^n}{\Delta t} + K_{tx} \frac{\phi^{n+1/4} + \phi^n}{2} &= 0, \\ \frac{\phi^{n+2/4} - \phi^{n+1/4}}{\Delta t} + K_{tz} \frac{\phi^{n+2/4} + \phi^{n+1/4}}{2} &= 0, \\ \frac{\phi^{n+3/4} - \phi^{n+2/4}}{\Delta t} + K_{a_1} \frac{\phi^{n+3/4} + \phi^{n+2/4}}{2} &= 0, \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^{n+3/4}}{\Delta t} + K_{a_2} \frac{\phi^{n+1} + \phi^{n+3/4}}{2} &= 0, \end{aligned} \quad (3.3.37)$$

где оператор адаптации далее расщеплен на волновую адаптацию K_{a_1} и на адаптацию за счет градиента давления K_{a_2} . Сформулированная разностная схема абсолютно устойчива. Если записать первое из этих уравнений в алгебраической форме, например, следующим образом:

$$\frac{\phi_{i,k}^{n+1/3} - \phi_{i,k}^n}{\Delta t} + \frac{1}{4\Delta x} (u_{i+1/2,k}^n \phi_{i+1,k}^{n+1/3} - u_{i-1/2,k}^n \phi_{i-1,k}^{n+1/3}) + \frac{1}{4\Delta x} (u_{i+1/2,k}^n \phi_{i+1,k}^n - u_{i-1/2,k}^n \phi_{i-1,k}^n) = 0, \quad (3.3.38)$$

то для решения этой системы линейных алгебраических уравнений можно использовать метод прогонки (Бахвалов и др., 2003).

Используя схему Кранка-Николсон, разностную схему для задачи волновой адаптации можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{w_{i,k+1/2}^* - w_{i,k+1/2}^{n+2/4}}{\Delta t} &= \frac{\lambda}{4} (\theta_{i,k+1}^* + \theta_{i,k}^*), \\ \frac{\theta_{i,k}^* - \theta_{i,k}^{n+2/4}}{\Delta t} &= -\frac{S}{4} (w_{i,k+1/2}^* + w_{i,k-1/2}^*), \end{aligned} \quad (3.3.39)$$

где величины со звездочками означают полусумму значений соответствующей переменной на текущем $(n + \frac{3}{4})$ и предыдущем $(n + \frac{2}{4})$ временных слоях. Эту систему путем простых алгебраических манипуляций можно свести к следующей системе линейных алгебраических уравнений относительно $\{w_{i,k+1/2}^*\}$:

$$w_{i,k+3/2}^* + 2\left(1 + \frac{8}{\lambda S \Delta t^2}\right) w_{i,k+1/2}^* + w_{i,k-1/2}^* = \frac{16}{\lambda S \Delta t^2} w_{i,k+1/2}^{n+2/4} + \frac{4}{S \Delta t} (\theta_{i,k+1}^{n+2/4} + \theta_{i,k}^{n+2/4}), \quad (3.3.40)$$

для решения которой можно применить метод прогонки, используя нулевые граничные условия по вертикали. Здесь верхним индексом $n + 2/4$ обозначены величины, полученные на предыдущем этапе расщепления задачи.

Система линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующая уравнение Пуассона, может быть решена как прямыми методами, так и итерационными. В первом случае можно использовать, например, дискретное преобразование Фурье по координате x (по синусам, если нулевые краевые условия, или по косинусам, если в качестве краевых условий – равенство нулю первых производных). Для коэффициентов Фурье в этом случае возникает система алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, которую можно решить методом факторизации (гауссова исключения).

Действительно, пусть разностная схема для уравнения Пуассона записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} r^2(\pi_{i+1,k} - 2\pi_{i,k} + \pi_{i-1,k}) + \pi_{i,k+1} - 2\pi_{i,k} + \pi_{i,k-1} &= (\Delta z)^2 F_{i,k}, \\ (i = 1, \dots, I-1, k = 1, \dots, K-1), \\ \pi_{0,k} = \pi_{I,k} &= 0 \quad (k = 0, \dots, K), \\ \pi_{i,K} = 0, \quad \pi_{i,1} - \pi_{i,0} &= \Delta z f_i \quad (i = 0, \dots, I), \end{aligned} \quad (3.3.41)$$

где $r = \Delta z / \Delta x$. В случае граничных условий Дирихле дискретное представление Фурье имеет вид (число π обозначено как $\underline{\pi}$):

$$\pi_{i,k} = \frac{2}{I} \sum_{p=1}^{I-1} \hat{\pi}_{p,k} \sin \frac{\pi i p}{I}, \quad \pi_{i\pm 1,k} = \frac{2}{I} \sum_{p=1}^{I-1} \hat{\pi}_{p,k} \sin \frac{\pi(i\pm 1)p}{I}.$$

Вычислив коэффициенты Фурье правой части

$$\hat{F}_{p,k} = \sum_{i=1}^{I-1} F_{i,k} \sin \frac{\pi i p}{I}, \quad \hat{f}_p = \sum_{i=1}^{I-1} f_i \sin \frac{\pi i p}{I} \quad (p = 1, \dots, I-1)$$

и подставив вместе с предыдущими формулами в разностную схему, можно получить для каждого p следующую систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей относительно $\{\hat{\pi}_k\}_p$:

$$\begin{aligned} \hat{\pi}_{p,k+1} - 2\left(2r^2 \sin^2 \frac{\pi p}{2I} + 1\right) \hat{\pi}_{p,k} + \hat{\pi}_{p,k-1} &= (\Delta z)^2 \hat{F}_{p,k}, \\ (p = 1, \dots, I-1), \end{aligned} \quad (3.3.42)$$

которую можно решить с учетом краевых условий по z после разложения их в ряд Фурье

$$\begin{aligned} \hat{\pi}_{p,K} = 0, \quad \hat{\pi}_{p,1} - \hat{\pi}_{p,0} &= \Delta z \hat{f}_{p,1/2} \\ (p = 1, \dots, I-1), \end{aligned} \quad (3.3.43)$$

методом прогонки. В случае граничных условий Неймана решение ищется в виде разложения по косинусам:

$$\pi_{i,k} = \frac{2}{I} \sum_{p=0}^I \hat{\pi}_{p,k} \cos \frac{\pi i p}{I}, \quad \pi_{i\pm 1,k} = \frac{2}{I} \sum_{p=0}^I \hat{\pi}_{p,k} \cos \frac{\pi(i\pm 1)p}{I}, \quad \hat{F}_{p,k} = \sum_{i=0}^I F_{i,k} \cos \frac{\pi i p}{I}. \quad (3.3.44)$$

На практике используется быстрое преобразование Фурье по общему тригонометрическому базису.

Конечный этап метода расщепления (3.3.37) состоит в коррекции поля скорости за счет учета составляющих градиента давления:

$$\begin{aligned} \frac{u_{i+1/2,k}^{n+1} - u_{i+1/2,k}^{n+3/4}}{\Delta t} &= -\frac{1}{\Delta x} (\pi_{i+1,k} - \pi_{i,k}), \\ \frac{w_{i,k+1/2}^{n+1} - w_{i,k+1/2}^{n+3/4}}{\Delta t} &= -\frac{1}{\Delta z} (\pi_{i,k+1} - \pi_{i,k}), \end{aligned} \quad (3.3.45)$$

причем учитывается, что должно выполняться условие бездивергентности для поля вектора скорости:

$$\frac{u_{i+1/2,k}^{n+1} - u_{i-1/2,k}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{w_{i,k+1/2}^{n+1} - w_{i,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} = 0.$$

Турбулентный перенос можно рассматривать как самостоятельные этапы расщепления, выделив отдельно перенос по горизонтали и перенос по вертикали. Как видно из (3.3.39), использование схемы Кранка-Николсон и в этом случае приводит к системе линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, для решения которой можно воспользоваться методом факторизации (см. раздел 4.4).

Таким образом, вычислительная технология для рассмотренной задачи о моделировании локальной циркуляции над термически неоднородной подстилающей поверхностью сводится к использованию двух базовых алгоритмов: метода решения трехдиагональных систем линейных уравнений и быстрого преобразования Фурье для решения разностного уравнения Пуассона. Задача хорошо распараллеливается, однако, следует заметить, что во многих задачах (например, для областей со сложной геометрией) приходится использовать приближенные методы решения эллиптических уравнений с привлечением для этого итерационных методов (см. раздел 4.5).

3.4. Специфика вычислительной технологии для области со сложной геометрией

Области со сложной геометрией встречаются во многих задачах геофизической гидродинамики. Часто для решения подобных задач используют криволинейные сетки, соответствующие границам области. Такой подход требует больших вычислительных затрат для генерации сетки, особенно в задачах с движущимися или деформируемыми границами. Иной способ решения гидродинамических задач в областях со сложной геометрией заключается в использовании традиционных декартовых сеток, при этом краевые условия на криволинейной границе аппроксимируются специальными методами. Поскольку в этом случае нет необходимости в разработке сложных алгоритмов покрытия области криволинейными сетками, то методы данного класса обладают достаточной универсальностью и не зависят от конкретной конфигурации области.

Первые работы, сочетающие криволинейные границы и декартовы сетки, относятся к первой половине XX века и связаны с решением эллиптических уравнений численными методами (Бахвалов и др., 2003). В настоящее время используются такие методы, как метод ступенчатого представления границы (stair-step method, de Zeeuw and Powell, 1993), метод скошенных ячеек (cut-cell method, Udaykumar et al., 2001, Ingram et al., 2003), метод погруженной границы (immersed boundary method, Mittal and Iaccarino, 2005). Метод ступенчатого представления границы основан на совмещении контура границы и

ближайших узлов сетки. Приближение границы ступеньками во многих случаях может оказаться слишком грубым. В методе скошенных ячеек для аппроксимации краевых условий изменяется форма ячеек, имеющих пересечение с криволинейной границей. Это приводит к тому, что вычислительная область представляется не декартовой сеткой; как следствие, метод скошенных ячеек не лишен недостатков тех методов, в которых расчетная область полностью покрывается адаптивной криволинейной сеткой.

В вычислительной гидродинамике для моделирования течений с большим числом Рейнольдса Re были разработаны варианты метода погруженной границы, в которых ее влияние на поток учитывается после дискретизации уравнений на декартовой сетке (Verzicco et al., 2000). Данный способ позволяет точно представить границу обтекаемой области, что особенно важно в вычислительной гидродинамике. Для точности аппроксимации геометрии области в этих методах значимыми являются способы интерполяции/экстраполяции значений в точках криволинейной границы, чем и объясняется большое разнообразие в существующих модификациях данного подхода. При решении задач с подвижными границами метод погруженной границы имеет очевидные достоинства по сравнению с методами, основанными на покрытии области криволинейными сетками, и успешно применялся для моделирования многих сложных течений (Yang and Balaras, 2006). Тем не менее, при его использовании возникает ряд проблем, связанных с отсутствием гладкости в полях скорости и давления при смещении границы на фиксированной декартовой сетке.

Численный метод. В ограниченной области Ω с границей Γ , в которой расположено N погруженных областей Ω_h^k , ограниченных замкнутыми, достаточно гладкими, границами Γ_h^k , $k=1, \dots, N$, течение вязкой несжимаемой жидкости можно описать следующей системой уравнений Навье-Стокса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{f}(\vec{x}, t), \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0 \quad \text{в } \Omega_f, \\ B\vec{u}(\vec{x}, t)|_{\Gamma} &= 0, \quad \vec{u}(\vec{x}, t_0) = \vec{u}_0, \\ \vec{u}(\vec{x}, t)|_{\Gamma_b^k} &= \vec{U}_b^k, \quad k=1, \dots, N, \end{aligned} \quad (3.4.1)$$

где B – оператор, определяющий известные краевые условия, функции $\vec{U}_b^k$ задают краевые условия Дирихле на погруженных границах Γ_b^k , а функция $\vec{u}_0$ – начальное условие. Функция $\vec{f}(\vec{x}, t)$ соответствует аппроксимации краевых условий и способ ее определения рассматривается далее при описании метода погруженной границы.

Для численного решения системы (3.4.1) используется метод конечных разностей на прямоугольной сетке Ω_h с разнесенным способом размещения переменных (скорость и давление) в ячейке. Для интегрирования уравнений по времени применяется метод дробных шагов, конвективные и диффузионные слагаемые в уравнении движения приближаются явной схемой Адамса-Бэшфорта второго порядка точности по времени. Систему уравнений Навье-Стокса в дискретном виде по времени можно условно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{u}^* - \vec{u}^n}{\Delta t} + (\vec{u} \cdot \nabla \vec{u})^{n+\frac{1}{2}} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p^n + \nu (\nabla^2 \vec{u})^{n+\frac{1}{2}} + \vec{f}^{n+1}(\vec{x}, t_{n+1}), \\ \nabla \cdot \vec{u}^{n+1} &= 0, \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

где Δt – шаг по времени, $\vec{u}^*$ – промежуточное дивергентное поле скорости,

$$(\vec{u} \cdot \nabla \vec{u})^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \vec{u}^n \cdot \nabla \vec{u}^n - \frac{1}{2} \vec{u}^{n-1} \cdot \nabla \vec{u}^{n-1}, \quad (\nabla^2 \vec{u})^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \nabla^2 \vec{u}^n - \frac{1}{2} \nabla^2 \vec{u}^{n-1},$$

а краевые условия заданы на $(n+1)$ -ом шаге. Проекция вектора $\vec{u}^*$ в подпространство соленоидальных векторов осуществляется с помощью разложения Ходжа (Brown et al., 2001):

$$\vec{v}(\vec{x}) = \vec{u}(\vec{x}) + \nabla \psi(\vec{x}), \quad (3.4.3)$$

где $\vec{v}(\vec{x})$ – произвольная функция, $\nabla \cdot \vec{u}(\vec{x}) = 0$, а $\psi(\vec{x})$ – скалярная функция, такая, что слагаемые в правой части формулы (3.4.3) ортогональны: $(u, \nabla \psi) = 0$. Данная схема приводит к уравнению Пуассона для поправки к давлению ϕ^{n+1} :

$$\Delta \phi^{n+1} = \frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{\Delta t}. \quad (3.4.4)$$

При этом значения вектора скорости и давления на новом шаге по времени определяются следующим образом:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^* - \Delta t \nabla \phi^{n+1}, \quad p^{n+1} = p^n + \rho \phi^{n+1}. \quad (3.4.5)$$

Для дискретизации адвективных слагаемых по пространству используется консервативная кососимметрическая форма второго порядка точности (Morinishi et al., 1998), а для диффузионных слагаемых – схема центральных разностей. Матрица системы уравнений (3.4.4) является симметричной разреженной матрицей (пяти- и семидиагональной в двухмерном и трехмерном случае, соответственно).

Выполнение краевых условий на погруженных границах Γ_b^k , $k=1, \dots, N$, достигается добавлением функции $\vec{f}(\vec{x}, t)$ в уравнение движения. Границы Γ_b^k при решении разностной задачи представляются набором из P_b^k точек и заданных краевых условий $\vec{u}(\vec{x}, t)|_{\Gamma_b^k} = \vec{U}_b^k$. Вводится оператор интерполяции L поля значений, заданных на сетке, в точки границы и оператор проектирования L^* в узлы сетки по значениям поля на дискретной границе:

$$\vec{F}^k = L\vec{f}, \quad F_i^k = \sum_{s \in \Omega_h} f_s d(\vec{x}_s - \vec{X}_i^k) \Delta S, \quad 1 \leq i \leq P_b^k, \quad (3.4.6)$$

$$\vec{f} = L^* \vec{F}^k, \quad f_s = \sum_{i=1}^{P_b^k} F_i^k d(\vec{x}_s - \vec{X}_i^k) \Delta l, \quad s \in \Omega_h, \quad (3.4.7)$$

где k – индекс погруженной границы Γ_b^k , заданной набором точек $\vec{X}_i^k$, $1 \leq i \leq P_b^k$, F_i^k – значения на погруженной границе в точке $\vec{X}_i^k$, $\vec{f}$ – значения на множестве Ω_h точек пространственной сетки области Ω с площадью (объемом) ячейки ΔS , Δl – характерный элемент длины (площади) границы. Функция $d(\vec{r})$ – дискретная аппроксимация дельта-функции на заданной сетке Ω_h , для которой существует широкий выбор способов определения. В работе (Su et al., 2007) используется следующая функция, аналогичная билинейной интерполяции, которую для двухмерной области на равномерной сетке с шагом h можно записать следующим образом:

$$d(\vec{x}_s - \vec{X}_i^k) = d_h \left(\frac{x_s - X_i^k}{h} \right) d_h \left(\frac{y_s - Y_i^k}{h} \right), \quad (3.4.8)$$

$$d_h(\vec{r}) = \begin{cases} (1 - |r|) / h, & |r| \leq 1 \\ 0, & |r| > 1 \end{cases}. \quad (3.4.9)$$

Несмотря на приемлемые результаты, полученные для задач воспроизведения течений со стационарными границами, применение формулы (3.4.9) в задачах с неоднородными граничными условиями приводит к появлению фиктивных осцилляций в интегральных характеристиках течения. Авторами статьи (Yang et al., 2009) предлагается преобразование известных $d(\vec{r})$, что позволяет повысить порядок гладкости и обеспечить выполнение сохранения моментов высших порядков данных функций, что приводит к существенному уменьшению амплитуды осцилляций. В обсуждаемых в разделе 5.1 численных расчетах использовалось следующее приближение дельта-функции (Roma et al., 1999):

$$d_h(r) = \begin{cases} \frac{1}{3h} (1 + \sqrt{1 - 3r^2}), & |r| \leq 0.5, \\ \frac{1}{6h} (5 - 3|r| - \sqrt{1 - 3(1 - |r|)^2}), & 0.5 \leq |r| \leq 1.5, \\ 0, & |r| > 1.5. \end{cases} \quad (3.4.10)$$

Для нахождения функции $\vec{f}(\vec{x}, t)$ вычисление промежуточного поля скорости $\vec{u}^*$ разделяется на несколько шагов:

$$\frac{\vec{u}^{r*} - \vec{u}^n}{\Delta t} + (\vec{u} \cdot \nabla \vec{u})^{n+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^n + \nu (\nabla^2 \vec{u})^{n+\frac{1}{2}}, \quad (3.4.11)$$

$$\frac{\vec{u}^* - \vec{u}^{r*}}{\Delta t} = \vec{f}^{n+1}(\vec{x}, t_{n+1}) \equiv L^* \vec{F}^{n+1}(\vec{x}_b, t_{n+1}), \quad (3.4.12)$$

где функция $\vec{f}^{n+1}(\vec{x}, t_{n+1})$ определяется через проекцию с помощью оператора L^* , заданного соотношением (3.4.7), соответствующих значений функции $\vec{F}^{n+1}(\vec{x}_b, t_{n+1})$ на погруженной границе. Применение оператора интерполяции (3.4.6) к соотношению (3.4.12) приводит к уравнению для значений в точках на погруженных границах:

$$\frac{L\vec{u}^* - L\vec{u}^{r*}}{\Delta t} = L\vec{f}^{n+1} \equiv LL^* \vec{F}^{n+1} \equiv A_b \vec{F}^{n+1}, \quad (3.4.13)$$

где A_b – симметричная блочно-диагональная квадратная матрица, число блоков равно числу погруженных границ N , при этом k -ый блок A_b^k матрицы A_b имеет размерность $P_b^k \times P_b^k$. Данные блоки имеют ленточную структуру, которая зависит от распределения точек погруженной границы на вычислительной сетке и используемой аппроксимации

дельта-функции. Значения промежуточного поля $L\vec{u}^*$ скорости в точках на погруженной границе заменяются известными граничными условиями $\vec{U}_b^k$ для скорости на $(n+1)$ -ом шаге по времени.

Таким образом, вычисление неизвестной добавочной функции $\vec{f}^{n+1}(\vec{x}, t_{n+1})$ сводится к решению системы линейных уравнений с матрицей A_b относительно $\vec{F}^{n+1}(\vec{x}_b, t_{n+1})$ с известной правой частью и применению оператора проектирования (3.4.7) к полученному решению:

$$\frac{\vec{U}_b^k - L\vec{u}^{*'}}{\Delta t} = A_b \vec{F}^{n+1}(\vec{x}_b, t_{n+1}), \quad (3.4.14)$$

$$\frac{\vec{u}^* - \vec{u}^{*'}}{\Delta t} = L^* \vec{F}^{n+1}(\vec{x}_b, t_{n+1}). \quad (3.4.15)$$

Существование для A_b обратной матрицы следует из отсутствия совпадающих точек в определении погруженных границ. Однако, при близком расположении точек Γ_b^k относительно шага сетки возможны проблемы с устойчивостью численного метода решения системы (3.4.14). При неравномерном распределении точек погруженной границы и различных значениях Δl необходима очевидная модификация операторов (3.4.6) и (3.4.7).

Изложенный выше метод нахождения добавочной функции приводит к тому, что краевые условия выполняются точно для промежуточного поля скорости $\vec{u}^*$ и лишь приближенно для скорости на $(n+1)$ -ом шаге по времени, полученной проекцией (3.4.5) на основе ограничения для скорости, выраженного уравнением неразрывности. Указанный недостаток характерен для многих вариантов метода погруженной границы (см., например, Guy and Hartenstine, 2010). Точность аппроксимации можно повысить проведением нескольких итераций на каждом шаге по времени. В работе (Mori and Peskin, 2008) описаны неявные методы, в которых требуется одновременное выполнение уравнения неразрывности и краевых условий для скорости $\vec{u}^{n+1}$, однако, применение предложенных схем для задач с подвижными границами требует значительных вычислительных ресурсов.

Стоит отметить, что приведенный метод погруженной границы не накладывает ограничений на дискретизацию по времени диффузионных слагаемых в системе уравнений Навье-Стокса неявными схемами (например, схемой Кранка-Николсон второго порядка), что важно при моделировании вязких течений с малым числом Рейнольдса. Для повышения точности решения в задачах обтекания тел широко применяются сгущенные сетки вблизи погруженных границ. Обобщение данного подхода в этом случае достаточно просто, если возможно выделение некоторой подобласти неравномерной сетки, включающей погруженную область, на которой шаг сетки остается постоянным. Иначе необходимо переопределение приближений дельта-функций на сетках с неравномерным шагом (Pinelli et al., 2010). В сравнении с другими вариантами метода погруженной границы приведенная методика лучше подходит для решения задач с нестационарной геометрией области и требует лишь пересчета операторов интерполяции (3.4.6), (3.4.7) и матрицы A_b на каждом шаге по времени.

Важной особенностью является легкость вычисления по известной функции $\vec{f}(\vec{x}, t)$ интегральных характеристик течения – коэффициента лобового сопротивления C_D и

коэффициента подъемной силы C_L . В двухмерном случае для стационарных погруженных границ коэффициенты C_D и C_L определяются следующим образом:

$$C_D = \frac{2F_D}{\Lambda U_C^2}, \quad F_D = - \int_{\Omega_h} f_x(\vec{x}) d\vec{x} = - \sum_{\vec{x} \in \Omega_h} f_x(\vec{x}) \Delta s, \quad (3.4.16)$$

$$C_L = \frac{2F_L}{\Lambda U_C^2}, \quad F_L = - \int_{\Omega_h} f_y(\vec{x}) d\vec{x} = - \sum_{\vec{x} \in \Omega_h} f_y(\vec{x}) \Delta s, \quad (3.4.17)$$

где U_C и Λ – характерная скорость течения и длина погруженной границы, соответственно, а $f_x(\vec{x})$ и $f_y(\vec{x})$ – компоненты вектора $\vec{f}(\vec{x}, t)$ по осям x и y , определяемого как решение системы (3.4.14).

Применение явной схемы для дискретизации системы уравнений Навье-Стокса и схем второго порядка аппроксимации пространственных производных приводит к тому, что основная доля расчетов приходится на решение уравнения Пуассона (3.4.4) и на арифметические операции, связанные с методом погруженной границы (3.4.14) – (3.4.17). Для решения конечно-разностного уравнения Пуассона (3.4.4) во всей области Ω_h с симметричной матрицей целесообразно использовать предобусловленный метод сопряженных градиентов (см. раздел 4.5).

ГЛАВА 4

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

С самого появления электронной вычислительной техники в конце 40-х годов XX в. проблемы прогноза погоды и климата всегда были и остаются теми объектами внимания науки, для которых существуют задачи, требующие самых высокопроизводительных вычислительных средств. Связано это, во-первых, с тем, что основной метод решения этих задач – численное решение системы уравнений гидротермодинамики – позволяет получать результаты, все более адекватно отражающие реально протекающие в атмосфере и океане процессы только при улучшении пространственного разрешения конечно-разностной сетки (увеличении количества членов разложения решения в спектральных моделях). Это неизбежно сопровождается ростом вычислительной сложности (количества выполняемых арифметических операций) при решении указанных задач. Естественно ожидать, что результаты численного решения перестанут существенно зависеть от пространственного разрешения тогда, когда шаг сетки позволит воспроизводить явно наименьшие неоднородности атмосферного (океанического) потока. Однако, эти неоднородности (размер наименьших турбулентных вихрей меньше 1 мм, а характерное горизонтальное разрешение современных глобальных атмосферных моделей составляет 50 – 100 км) настолько малы, что в обозримом будущем соответствующее разрешение моделей не может быть достигнуто. Вторая причина роста вычислительной сложности климатических моделей и, соответственно, необходимости использования многопроцессорной вычислительной техники, заключается в непрерывном включении в модели новых параметризаций физических, химических и биологических процессов. Вследствие этого исторически в течение второй половины XX в. – начале XXI в. происходил переход от атмосферных моделей к моделям совместной динамики атмосферы и океана (с упрощенным представлением процессов на суше) и от моделей совместной динамики атмосферы и океана к моделям системы планеты Земля.

4.1. Суперкомпьютер как инструмент численного моделирования в физике климатической системы

Наряду с большими возможностями, которые предоставляют суперкомпьютеры для решения геофизических задач, при их использовании возникают многочисленные сложности, связанные с эффективным использованием вычислительных ресурсов. Эту проблему можно пояснить на примере персонального (однопроцессорного) компьютера. Максимальное количество арифметических операций, которые может производить процессор в единицу времени, определяемое его архитектурой и рядом количественных характеристик, в первую очередь, частотой, называется пиковой производительностью. Однако приложение не может выполняться с пиковой производительностью хотя бы потому, что какое-то количество операций во время его работы будет выполняться операционной системой и другими запущенными к этому моменту приложениями. Основная проблема заключается даже не в этом, а в том, что, как правило, имеет место неэффективное взаимодействие процессорного устройства с оперативной памятью, в которой хранятся операнды и сохраняются результаты арифметических операций, выполняемых процессором. В результате, процессор периодически «простаивает», поскольку не получает операнды следующей операции сразу по завершении предыдущей.

Во многом это связано с ограниченной скоростью доступа к оперативной памяти, для ускорения которого в настоящее время во всех компьютерах существует кэш-память (или несколько уровней кэш-памяти). Объем этой памяти существенно меньше объема основной оперативной памяти, в то время как скорость доступа к ее ячейкам значительно выше. В кэш-памяти хранятся недавно использованные операнды, так что их

многократное повторное использование позволяет значительно ускорить выполнение задачи. Оптимизация работы с кэш-памятью позволяет в несколько раз ускорить небольшую программу, однако для больших кодов, таких, например, как коды климатических моделей, этот подход представляется слишком трудоемким. Существует множество других видов оптимизации алгоритмов транслируемого кода, например, векторизация операций, которая автоматически выполняется современными компиляторами языков высокого уровня (Fortran, C/C++ и др.). Несмотря на это, производительность больших задач, в том числе атмосферных моделей, составляет, как правило, несколько процентов от пиковой производительности арифметико-логического устройства. Эта проблема, очевидно, сохраняется и для суперкомпьютеров.

Основная идея, которой, несмотря на огромное разнообразие технологических решений, следует современное развитие суперкомпьютеров, заключается в параллельной обработке данных множеством однотипных арифметико-логических устройств (Воеводин и Воеводин, 2002). Эта идея в последнее время все шире используется и в персональных компьютерах: наращивание частоты одного процессора уже не является фактором увеличения его производительности, поскольку энергопотребление процессора пропорционально квадрату его частоты, а минимизация энергопотребления стала одним из приоритетов развития компьютерной отрасли.

С конца 60-х годов прошлого века все наиболее мощные вычислительные системы создавались как многопроцессорные (Воеводин, 2006). Это означает, что в суперкомпьютере функционирует множество процессоров, обрабатывающих параллельные потоки данных (операндов). Обработка этих данных никогда не происходит полностью независимо, так что периодически для продолжения вычислений каждому процессору требуются результаты расчетов, полученные в других потоках обработки. Таким образом, в ожидании необходимых данных от других потоков этот процессор не выполняет вычислительной работы, что опять же приводит к снижению эффективности выполнения приложения.

Суперкомпьютеры (или многопроцессорные вычислительные системы) делятся на два больших класса: многопроцессорные системы на общей памяти (SMP – shared memory processors или мультипроцессоры) и многопроцессорные системы с распределенной памятью (мультикомпьютеры). Многопроцессорные системы на общей памяти используют единое адресное пространство оперативной памяти. Это означает, что если один процессорный элемент обратился к ячейке с номером n , и другой элемент обратился к ячейке с тем же номером, то оба получают значение переменной из одной и той же ячейки (рис. 4.1.1).



Рис. 4.1.1. Схема параллельного компьютера с общей памятью (Воеводин и Воеводин, 2002).

Вычислительные системы с распределенной памятью организованы таким образом, что каждому процессору непосредственно доступны только данные, хранящиеся в связанной с ним на аппаратном уровне оперативной памяти, а для получения данных из оперативной памяти другого процессора необходима их пересылка по коммуникационной сети, объединяющей все вычислительные узлы системы (рис. 4.1.2).



Рис. 4.1.2. Схема параллельного компьютера с распределенной памятью (Воеводин и Воеводин, 2002).

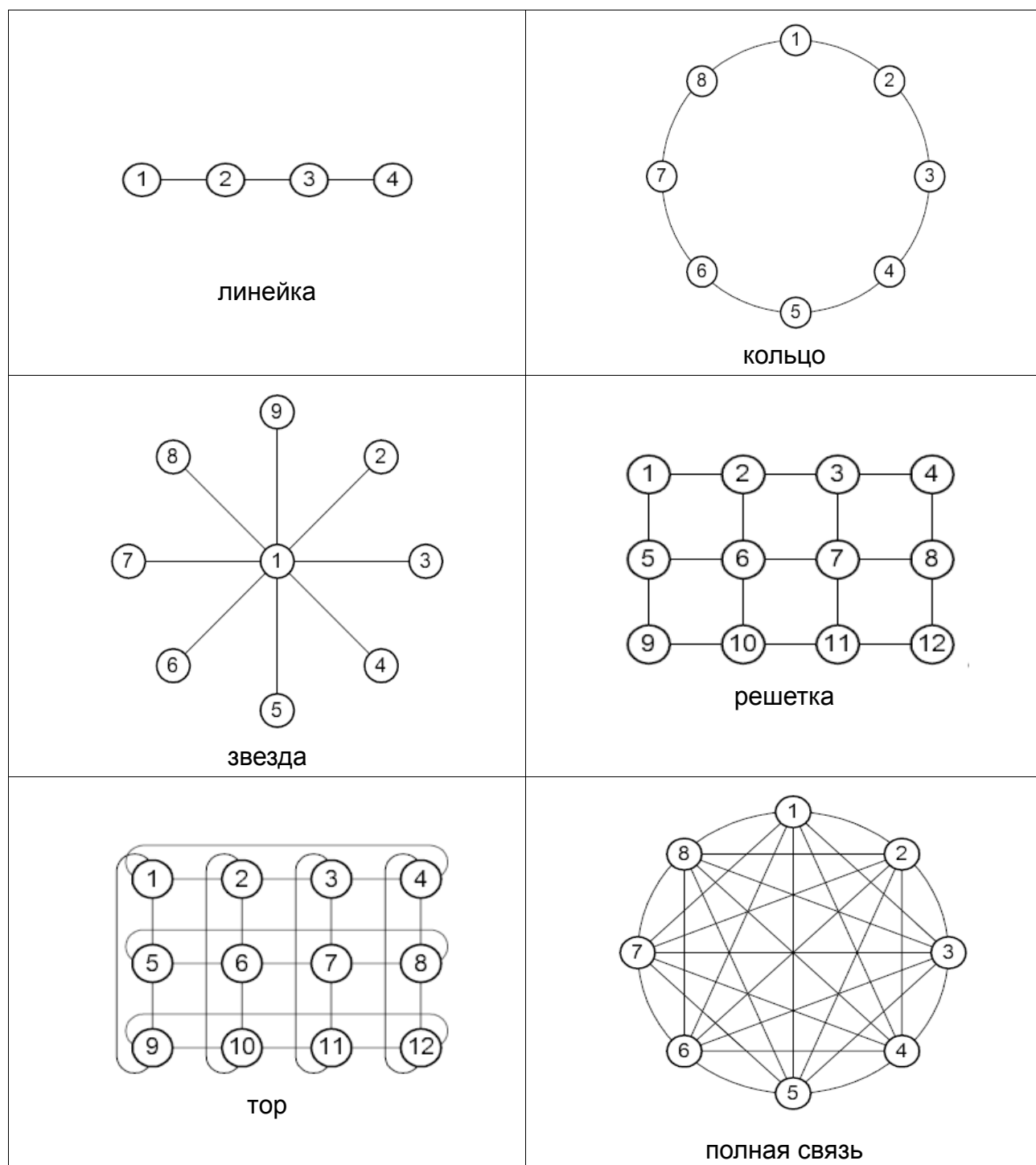


Рис. 4.1.3. Топологии коммуникационной сети компьютеров с распределенной памятью (Воеводин и Воеводин, 2002).

Программирование для систем с общей памятью проще и, кроме того, в этих системах не тратится время на пересылку данных между процессорами. Однако, по техническим причинам количество процессоров, которое можно установить над общей памятью, ограничено несколькими сотнями, что значительно сокращает возможности ускорения вычислительно сложных программ. В то же время, построение систем с распределенной памятью оказывается значительно проще и дешевле. Элементами такой системы являются отдельные процессоры (или узлы, содержащие несколько процессорных ядер на общей памяти). Эти элементы объединяются коммуникационной сетью, причем количество элементов может быть очень велико (десятки и даже сотни тысяч у самых мощных суперкомпьютеров). Такие масштабируемые многопроцессорные системы с распределенной памятью, собранные из стандартных комплектующих, получили название кластеров и они составляют в настоящее время подавляющее большинство мировых суперкомпьютерных систем (<http://www.top500.org>). Однако программировать на кластерах сложнее, чем на SMP-системах.

Важной характеристикой мультимикомпьютеров является топология коммуникационной сети, различные варианты которой представлены на рис. 4.1.3. Каждая из простых топологий (линейка, кольцо, звезда) оказывается оптимальной для одних приложений и неэффективной – для других. Например, топология «звезда» хорошо подходит для задач, в которых процессоры работают по схеме мастер/рабочие (master/slave). В этом случае процессоры «рабочие» выполняют однотипный набор операций над одинаковым объемом данных и результаты обработки высылают «мастеру», функция которого состоит в распределении данных и операций между «рабочими» и в последующей обработке результатов расчетов, ими полученных. Простейший пример алгоритма, где может быть реализована такая схема, – вычисление суммы большого количества чисел путем вычисления частичных сумм на отдельных процессорах и последующего их суммирования «мастером».

Желательно, чтобы топология коммуникационной среды обеспечивала эффективную работу широкого круга задач, а не узкого класса алгоритмов. В этом смысле идеальной является топология полной связи, однако ее реализация очень сложна для компьютеров с большим количеством процессоров. Поэтому наиболее предпочтительными оказываются топологии «промежуточной сложности», обеспечивающие компромисс между количеством коммуникационных элементов и требованием максимума скорости передачи данных между произвольной парой процессорных элементов. С этой точки зрения одной из лучших топологий является тор.

В многопроцессорных компьютерах с распределенной памятью часть времени выполнения программы используется для вычислений, а оставшаяся часть – для обмена данных между процессорами и на синхронизацию их работы. Отношение количества производимых арифметических операций к количеству пересылаемых данных является важной характеристикой алгоритма. Чем больше это отношение, тем, при прочих равных условиях, программа лучше масштабируется, т. е. демонстрирует ускорение, пропорциональное количеству используемых процессорных элементов. В спектре задач, реализуемых на суперкомпьютерах, лучше всего масштабируются приложения, в которых количество обменов невелико по сравнению с количеством вычислительных операций, а хуже всего – в частности, задачи геофизической гидродинамики, в которых имеет место обратное соотношение. Гидродинамические задачи в большинстве случаев масштабируются удовлетворительно только до 100 – 1000 процессоров.

Необходимо также отметить важность понятия портируемости программ, под которым понимается не только корректное выполнение алгоритма на компьютерах разной архитектуры, но и его эффективность. Для многопроцессорных систем портируемость программ, особенно в части эффективности, как правило, значительно ниже, чем для персональных компьютеров. Это связано, в основном, с тем, что эффективность

параллельных программ сильно зависит от скорости передачи данных между процессорами, так что различные конструктивные решения при проектировании коммуникационной сети приводят к разной масштабируемости заданного приложения. Так, в суперкомпьютерах семейства Blue Gene, разработанных компанией IBM, реализована очень эффективная сеть с топологией трехмерного тора (трехмерный аналог двумерного тора, изображенного на рис. 4.1.3). Это позволяет получать высокие показатели масштабируемости климатических моделей (например, в Немецком климатическом вычислительном центре, Гамбург) на таких системах. С другой стороны, на компьютерах Blue Gene используются процессоры IBM PowerPC 440 с низкой частотой (700 МГц), так что при использовании небольшого количества таких процессоров параллельное приложение будет выполняться медленнее, чем на кластере, построенном, например, на одном из современных процессоров Intel. Однако, при использовании большого количества процессоров (несколько сотен) существенное значение будут иметь преимущества коммуникационной сети компьютера IBM.

4.2. Технологии параллельного программирования

MPI. Наиболее распространенной технологией программирования для параллельных вычислительных систем с распределенной памятью является MPI (Message Passing Interface). Основной способ взаимодействия процессов в рамках MPI состоит в передаче сообщений между параллельными процессами (Воеводин и Воеводин, 2002). Интерфейс MPI поддерживает создание параллельных программ в стиле MIMD (Multiple Instruction Multiple Data), что подразумевает объединение процессов с различными исходными текстами. Однако на практике наиболее удобной является модель SIMD (Single Instruction Multiple Data), подразумевающая одинаковый код для всех процессов.

В MPI предполагается, что каждый процесс работает в своем адресном пространстве. Для локализации взаимодействия процессы объединяются в группы, для которых предоставляются отдельные среды для обмена данными – коммутаторы. Процессы могут взаимодействовать только внутри коммутатора, а сообщения, отправленные в разных коммутаторах, не пересекаются и не мешают друг другу. Все порожденные процессы в начале программы объединены в рамках предопределенного коммутатора **MPI_COMM_WORLD**. Каждому процессу в рамках каждой из групп, в которых он состоит, присваивается уникальный идентификатор – номер процесса. Таким образом, двумя основными идентификаторами процесса являются коммутатор и номер в коммутаторе.

Общую схему MPI-программы, написанной на языке C, можно представить следующим образом (Корнеев, 2000, Антонов, 2004):

```
int main( int argc, char **argv )
{
    ... ..
    MPI_Init( &argc, &argv );
    ... ..
    MPI_Finalize( );
    ... ..
}
```

Функции **MPI_Init()**, в качестве параметров которой задаются аргументы командной строки, и **MPI_Finalize()** служат для инициализации и завершения параллельной части

программы. До вызова **MPI_Init()** допускается вызов функции проверки инициализации MPI:

MPI_Initialized(int* flag)

Параметр **flag** равен 1, если функция **MPI_Init()** уже была вызвана, и 0 – в противном случае. Запрещается вызов любых функций MPI, в том числе **MPI_Init()**, после вызова **MPI_Finalize()**.

Для определения числа параллельных процессов (**size**) в коммуникаторе **comm** и номера процесса (**rank**) в данном коммуникаторе используются функции:

MPI_Comm_size(MPI_Comm comm, int* size),

MPI_Comm_rank(MPI_Comm comm, int* rank),

где **MPI_Comm** – предопределенный тип MPI для описания коммуникатора.

Функции передачи сообщений в MPI можно разделить на две группы: функции для взаимодействия двух отдельных процессов программы и функции, предполагающие, что в операции должны быть задействованы все процессы коммуникатора. Функции первой категории, реализующие операции типа “точка – точка”, также можно разделить на два класса: функции с блокировкой (с синхронизацией) и функции без блокировки (асинхронные). Передача сообщений с блокировкой осуществляется следующим образом:

MPI_Send(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int msgtag, MPI_Comm comm),

где

- **buf** – адрес начала передаваемого сообщения,
- **count** – число передаваемых элементов,
- **datatype** – тип элементов, который указывается с помощью предопределенных констант: **MPI_CHAR**, **MPI_UNSIGNED_CHAR**, **MPI_INT**, **MPI_FLOAT**, **MPI_DOUBLE** и др., или с помощью производных типов (Корнеев, 2000, Антонов, 2004),
- **dest** – номер процесса получателя,
- **msgtag** – идентификатор сообщения,
- **comm** – идентификатор коммуникатора.

Блокировка обеспечивает возможность повторного использования параметров после возврата из подпрограммы. Это, однако, не означает ни того, что сообщение получено процессом **dest**, ни того, что сообщение покинуло процессорный элемент, на котором выполняется процесс, запустивший **MPI_Send()**. Способ выполнения данного требования остается за разработчиками конкретной MPI-реализации.

Прием сообщения с блокировкой осуществляется с помощью процедуры

int MPI_Recv(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status),

где

- **buf** – адрес начала буфера для приема сообщения,
- **count** – максимальное число элементов в принимаемом сообщении,
- **datatype** – тип элементов принимаемого сообщения,
- **source** – номер процесса-отправителя (**MPI_ANY_SOURCE** – принимается

- сообщение от любого процесса),
- **msgtag** – идентификатор принимаемого сообщения (**MPI_ANY_TAG** – принимается сообщение с любым идентификатором),
- **comm** – идентификатор коммуникатора,
- **status** – параметры принятого сообщения.

Блокировка при приеме сообщения приводит к тому, что после возврата из функции все элементы уже приняты и расположены в буфере **buf**. Число элементов принимаемого сообщения не должно превосходить значения **count**. Значения номера процесса-отправителя, идентификатора сообщения и кода ошибки доступны через значения полей структуры **MPI_Status**: **status.MPI_SOURCE**, **status.MPI_TAG**, **status.MPI_ERROR**. В стандарте оговорено, что если один процесс последовательно посылает два сообщения другому процессу, соответствующие одному и тому же вызову **MPI_Recv**, то первым будет принято сообщение, которое было отправлено раньше. Вместе с тем, если два сообщения были одновременно отправлены разными процессами, то порядок их получения принимающим процессом заранее не определен.

Структуру приходящего сообщения можно определить процедурой **MPI_Probe**:

int MPI_Probe(int source, int msgtag, MPI_Comm comm., MPI_Status *status)

Возврат из функции не произойдет до тех пор, пока сообщение с подходящим идентификатором и номером процесса-отправителя не будет доступно для получения, но при этом самого получения сообщения не происходит. Точное число элементов в принимаемом сообщении после вызова **MPI_Probe** (число принятых элементов после вызова **MPI_Recv**) можно узнать процедурой **MPI_Get_count**:

int MPI_Get_count(MPI_Status *status, MPI_Datatype, int *count)

При использовании блокирующих операций приема – передачи сообщений необходимо помнить о возможности возникновения тупиковых ситуаций. Одним из способов разрешения тупиковой ситуации является применение процедуры совмещения приема и передачи сообщений с блокировкой:

int MPI_Sendrecv(void *sbuf, int scount, MPI_Datatype stype, int dest, int stag, void *rbuf, int rcount, MPI_Datatype rtype, int source, MPI_Datatype rtag, MPI_Comm comm., MPI_Status *status)

Параметры **sbuf**, **scount**, **stype**, **dest** определяют передачу сообщения, а параметры **rbuf**, **rcount**, **rtype**, **source**, **rtag** – структуру принимаемого сообщения, для которого заполняется параметр **status**. Принимающий и отправляющий процессы могут являться одним и тем же процессом. Буферы передачи и приема данных не должны пересекаться.

В MPI также предусмотрена возможность асинхронной передачи данных. Возврат из процедур данной группы осуществляется сразу после вызова, а обработка асинхронной операции обмена происходит одновременно с дальнейшим выполнением программы. Передача и прием сообщения без блокировки проводится с помощью следующих процедур:

int MPI_Isend(void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request),

int MPI_Irecv(void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request)

Параметры процедур для асинхронного обмена аналогичны процедурам обмена с блокировкой, за исключением дополнительного параметра **request** категории **MPI_Request** – идентификатора конкретной асинхронной операции. Параметр **request** используется для последующей проверки или ожидания завершения приема-передачи сообщения. Для ожидания завершения асинхронной операции используются функции:

```
int MPI_Wait( MPI_Request *request, MPI_Status *status ),
```

```
int MPI_Waitall( int count, MPI_Request *requests, MPI_Status *statuses ),
```

где параметр **count** определяет число идентификаторов асинхронных операций, а **request (requests)** представляют собой идентификаторы операций асинхронного приема **MPI_Irecv()** или передачи **MPI_Isend()**. Выполнение процесса блокируется до тех пор, пока все операции обмена, ассоциированные с указанными идентификаторами, не будут завершены. Проверка выполнения асинхронных операций реализуется с помощью функций:

```
int MPI_Test( MPI_Request *request, int* flag, MPI_Status *status )
```

```
int MPI_Testall( int count, MPI_Request *requests, int *flag, MPI_Status *statuses )
```

Параметр **flag** принимает значение 1, если все операции, ассоциированные с указанными идентификаторами, завершены, и 0, если какая-либо операция не завершилась. После выполнения процедур ожидания и завершения идентификаторы выполненных асинхронных операций устанавливаются в значение **MPI_REQUEST_NULL**. Получение информации о поступлении и структуре ожидаемого сообщения без блокировки возможно с помощью функции:

```
int MPI_Iprobe( int source, int msgtag, MPI_Comm, int* flag, MPI_Status *status )
```

В параметре **flag** возвращается значение 1, если сообщение с подходящими атрибутами уже может быть принято (в этом случае ее действие аналогично **MPI_Probe**), и значение 0, если сообщение с указанными атрибутами недоступно.

При обмене сообщениями без блокировки допускается группировка операций, что позволяет в ряде случаев снизить накладные расходы, возникающие в рамках одного процессора при обработке и перемещении необходимой информации между процессом и сетевым контроллером. Формирование запроса операций обмена осуществляется следующими процедурами:

```
int MPI_Send_init( void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request )
```

```
int MPI_Recv_init( void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request )
```

Параметры приведенных функций полностью совпадают с функциями **MPI_Isend()**, **MPI_Irecv()**. Пересылка и прием данных не начинается до вызова функции **MPI_Startall**:

```
int MPI_Startall( int count, MPI_Requests *requests ),
```

где **count** – число отложенных запросов на взаимодействие с идентификаторами **requests**. MPI также предоставляет (Воеводин и Воеводин, 2002) модификации функции передачи сообщений **MPI_Send()**:

MPI_Ssend() – передача сообщения с синхронизацией. Выход из процедуры происходит при инициализации приема сообщения процессом-получателем.

MPI_Rsend() – передача сообщения по готовности, что предполагает предварительную инициализацию приема сообщения процессом-получателем.

MPI_Bsend() – передача сообщения с буферизацией. Если прием посылаемого сообщения еще не был инициализирован процессом-получателем, то сообщение записывается в буфер и происходит немедленный возврат из функции. Рекомендуется явное выделение памяти для всех пересылок с буферизацией с помощью функции:

int MPI_Buffer_attach(void* buf, int size)

Размер массива **size** должен превосходить общий размер посылаемого сообщения как минимум на величину, определяемую константой **MPI_BSEND_OVERHEAD**. Для освобождения памяти, выделенной для буферного массива, служит функция:

int MPI_Buffer_detach(void* buf, int* size)

MPI_Buffer_detach() возвращает адрес и размер буфера, что в ряде случаев позволяет обеспечить возможность временной замены и последующего восстановления буфера.

Аналогично трем модификациям функции **MPI_Send** предусмотрены три дополнительных варианта функций передачи сообщений без блокировки: **MPI_Ibsend**, **MPI_Issend**, **MPI_Irsend**, а также дополнительные функции инициализации операции передачи сообщения (Воеводин и Воеводин, 2002): **MPI_Bsend_init**, **MPI_Ssend_init**, **MPI_Rsend_init**. Сообщение, отправленное любой из процедур **MPI_Send**, **MPI_Isend** и любой модификацией, может быть принято любой из процедур **MPI_Recv** и **MPI_Irecv**. Другой тип взаимодействия процессов в MPI, в котором участвуют все процессы коммутатора, реализуется операциями коллективного взаимодействия.

Важным классом коллективных операций являются функции для проведения операции редукции данных. Предполагается, что в каждом процессе хранятся некоторые данные, над которыми выполняется единая операция, общая для всех процессов коммутатора. Функция **MPI_Allreduce()** предназначена для последовательного выполнения **count** независимых глобальных операций **op** над элементами буфера **sbuf**:

int MPI_Allreduce(void* sbuf, void* rbuf, int count, MPI_Datatype, MPI_Op, MPI_Comm comm)

Результаты выполнения всех **count** операций записываются в буфер **rbuf** каждого процесса. Значения параметров **count**, **datatype**, **op** и **comm** у всех процессов должны быть одинаковыми. Операция **op** может быть либо предопределенной операцией MPI (**MPI_MAX**, **MPI_MIN**, **MPI_SUM**, **MPI_PROD** и т.д., см. Антонов, 2009), либо операцией, определенной пользователем. Если результат операции редукции требуется записать в буфер **rbuf** некоторого процесса **root**, то применяется функция **MPI_Reduce()**:

int MPI_Reduce(void *sbuf, void *rbuf, int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Op op, int root, MPI_Comm comm)

Для рассылки сообщения от одного из процессов всем процессам коммутатора, включая рассылающий процесс, применяется функция **MPI_Bcast()**:

int MPI_Bcast(void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, MPI_Comm comm)

Для явной синхронизации процессов в MPI определена специальная функция:

int MPI_Barrier(MPI_Comm comm)

Функция блокирует работу вызвавших ее процессов до тех пор, пока все оставшиеся процессы коммуникатора **comm** также не выполнят эту процедуру. Данная функция относится к коллективным, т.е. все процессы коммуникатора должны выполнить вызов **MPI_Barrier()**.

Подробное описание всех возможностей MPI и примеры решения некоторых задач, требующих взаимодействия процессов, можно найти в книгах (Воеводин и Воеводин, 2002, Антонов, 2004). Возможности стандарта MPI-2 (в частности, одностороннее взаимодействие процессов и параллельная реализация ввода-вывода) рассматриваются в книге (Gropp et al. 1999).

OpenMP. Одним из наиболее популярных средств программирования для компьютеров с общей памятью в настоящее время является технология OpenMP (Chapman and Jost, 2008, Антонов, 2009). Интерфейс OpenMP задуман как стандарт для программирования на масштабируемых SMP-системах (SSMP, ccNUMA и других) в модели общей памяти (shared memory model). Стандарт OpenMP определяет набор директив компилятора, вспомогательных функций и переменных среды. Параллельные вычисления реализуются с помощью многопоточности, в которой «главный» (master) поток создает набор «подчиненных» (slave) потоков, и задача распределяется между ними. Предполагается, что потоки выполняются параллельно на компьютере с несколькими процессорами, причем количество процессоров не обязательно должно совпадать с количеством потоков. Важным достоинством технологии OpenMP является возможность реализации так называемого инкрементального программирования, что позволяет быстро получить параллельный вариант программы. В последовательный код добавляются новые директивы, описывающие параллельные области, что не затрагивает другие части программы. Такой подход позволяет вести создание параллельной версии шаг за шагом, что упрощает программирование и отладку на многопроцессорных системах.

Большинство современных компиляторов поддерживают трансляцию программ, содержащих конструкции OpenMP. Для этого достаточно добавления специальных ключей (например, ключ для gcc/gfortran: `-fopenmp`, для icc/ifort: `-openmp` и т.д.). Программа, созданная на основе технологии OpenMP, может быть использована и в качестве последовательной программы. Директивы OpenMP просто игнорируются последовательным компилятором, а для функций OpenMP в стандарте определены специальные «заглушки» (stubs).

Программы, написанные с помощью OpenMP, представляют собой совокупность последовательных блоков, выполняемых единственной нитью, и параллельных блоков, при входе в которые порождаются дополнительные нити (Антонов, 2009). Допускается вложенность параллельных областей. Выполнение параллельной области в OpenMP описывается указанием специальных директив компилятору:

#pragma omp directive-name [clause [,] clause] ...]

Директива предназначена для блока, непосредственно следующего за ней в тексте программы. Помимо директив компилятору, OpenMP предоставляет набор дополнительных функций времени выполнения. В общем случае, параллельной области должна предшествовать директива:

#pragma omp parallel [clause [,] clause] ...]

В качестве параметров для данной директивы можно указать:

- **if (условие)** – условное выполнение параллельного блока,
- **num_threads (integer)** – явное определение числа нитей в параллельной области,
- **private (список переменных)** – список локальных для каждой нити переменных,
- **shared (список переменных)** – список общих для всех нитей переменных,
- **firstprivate (список переменных)** – список локальных переменных с

инициализацией по значению этих переменных в нити-мастере,

- **reduction (оператор: список)** – редукция результата выполнения на нитях для переменных из списка с использованием указанного оператора (C: +,*,-,&|,^,&&|| ; Fortran: +,*,-,and,.,or,.,eqv,.,neqv,.,max,min,iand,ior,ieor).

Для идентификации нитей в параллельном блоке, каждой из них присваивается целочисленное выражение от 0 (нить-мастер) до OMP_NUM_THREADS–1. Для определения идентификатора нити используется функция:

int omp_get_thread_num(void)

Число нитей в текущем параллельном блоке программы можно узнать с помощью функции:

int omp_get_num_threads(void)

Является ли текущая область параллельной, можно определить по значению, возвращаемому функцией (1 – при вызове из параллельной области и 0 – в противном случае):

int omp_in_parallel(void)

Наиболее часто используемой конструкцией OpenMP является директива для распределения итераций цикла между различными нитями в параллельной области:

#pragma omp for [claus [,] clause] ...]

Директива относится к расположенному следом блоку, содержащему циклы **for (; ;)**. Если вся параллельная область представляет собой цикл, то допускается объединение директив **#pragma omp parallel** и **#pragma omp for**:

#pragma omp parallel for [clause [,] clause] ...]

Такое совмещение директив разрешается и для других специализированных конструкций OpenMP.

В качестве параметров директивы **#pragma omp for** возможна спецификация локальных (и дополнительного способа их инициализации) и общих переменных, а также выполнение операции редукции аналогично общей директиве **#pragma omp parallel**. Для того чтобы добиться максимально равномерной загруженности нитей и, тем самым, наиболее эффективного выполнения программы, в директиве **#pragma omp for** доступен параметр для задания способа распределения итераций цикла между нитями (Антонов, 2009):

schedule (type[, chunk])

В качестве параметра **type** возможны следующие значения:

- **static** – блочно-циклическое распределение итераций цикла (размер блока задается параметром **chunk**),
- **dynamic** – динамическое распределение с фиксированным размером блоком **chunk** (в этом случае первая, выполнившая итерации нить, получает первый свободный блок следующих итераций),
- **guided** – динамическое распределение нитей, при котором размер блока уменьшается с некоторого начального значения, определенного реализацией до значения **chunk**,
- **auto** – способ распределения выбирается компилятором и/или системой

- выполнения,
- **runtime** – распределение итераций определяется при выполнении программы.

Статический способ позволяет уже в момент написания программы точно определить распределение итераций по нитям. Однако он не учитывает текущей загруженности процессоров, неравномерность времени выполнения различных итераций и некоторых других факторов. Данные обстоятельства в той или иной степени учитываются динамическими способами распределения итераций. Можно также отложить решение по способу распределения итераций до непосредственного выполнения программы. В этом случае для распределения итераций используется значение переменной среды **OMP_SCHEDULE**. Для задания и чтения значения **OMP_SCHEDULE** предназначены следующие функции:

void omp_set_schedule(omp_sched_t type, int chunk)

void omp_get_schedule(omp_sched_t* type, int* chunk)

Допустимые значения для работы с **OMP_SCHEDULE** описаны в файлах `omp.h` (`omp_lib.h`).

Для ассоциации директивы с n последовательно вложенными циклами используется опция **collapse(n)**. По умолчанию при выходе из цикла происходит неявная синхронизация нитей, а для продолжения выполнения без синхронизации существует опция **nowait**. В параллельных циклах OpenMP запрещает использовать конструкции, изменяющие последовательность выполнения цикла, такие как конструкции выхода из цикла (C: **break**), но допускается применение оператора **continue**. В C++ невозможен выброс исключений в цикле.

В качестве примера, пусть необходимо вычислить скалярное произведение двух векторов x и y размерности n . Это можно записать следующим образом:

```
#pragma omp parallel for private( i ) shared( x, y, n ) reduction ( + : dp )
```

```
for ( i = 0; i < n; i++ ) dp += x[ i ] * y[ i ];
```

Если в параллельной области необходимо выделить часть кода для выполнения единственной нитью, то можно воспользоваться директивами OpenMP:

```
#pragma omp single [clause [,] clause] ... ]
```

```
#pragma omp master
```

Директива **#pragma omp single** выделяет блок для выполнения одной из нитей в параллельной области, при этом остальные нити ожидают завершения выполнения блока (отменить неявную синхронизацию можно параметром **nowait**). Директива **#pragma omp master** выделяет участок на выполнение нитью мастером и не предполагает дополнительной синхронизации. Для оформления параллельного блока, состоящего из независимых фрагментов, каждый из которых выполняется своей нитью, используется директива:

```
#pragma omp sections [clause [,] clause] ... ]
```

Каждый из фрагментов явно задается директивой **#pragma omp section**:

```
#pragma omp sections
```

```
{
```

#pragma omp section

```
{  
... ..  
}
```

#pragma omp section

```
{  
... ..  
}
```

```
... ..  
}
```

Если число нитей больше числа секций, то способ закрепления секций за конкретными нитями определяется реализацией OpenMP. Основные параметры директивы **#pragma omp sections** повторяют рассмотренные выше. В конце секции предполагается неявная синхронизация нитей, а если в ней нет необходимости, то может быть использована опция **nowait**.

Для синхронизации нитей в параллельном блоке существует ряд дополнительных директив OpenMP. При этом нужно учитывать, что использование излишних синхронизаций может существенно замедлить программу. Наиболее общим (и более дорогим) способом является барьерная синхронизация нитей директивой:

#pragma omp barrier

В OpenMP также возможно определение секции параллельной области, которая может выполняться лишь одной нитью:

#pragma omp critical [(*<имя критической секции>*)]

Таким образом, если секция уже выполняется какой-либо нитью, то все другие нити, выполнившие директиву для секции с данным именем, блокируются до тех пор, пока вошедшая нить не выполнит данную секцию. Частным случаем критической секции является директива для выделения атомарной операции:

#pragma omp atomic

Действие данной директивы относится к непосредственно следующему за ней оператору присваивания. Атомарной является только работа с переменной в левой части оператора присваивания, а на вычисление правой части не накладывается никаких ограничений.

Общим способом синхронизации обращений к памяти между нитями является директива **flush**:

#pragma omp flush [(*список*)]

Выполнение данной директивы предполагает, что значения всех переменных (или переменных из списка, если он задан), временно хранящиеся в регистрах, кэш-памяти текущей нити и др., будут занесены в основную память. При этом изменения значений переменных, сделанные нитью во время работы, становятся видимыми остальным нитям. Для сокращения накладных расходов на синхронизацию допускается явное описание отдельных переменных для согласованного представления в памяти. Директивы синхронизации (**#pragma omp barrier**, **#pragma omp critical**), а также вход и выход из

параллельной области, предполагают неявное присутствие директивы **flush**, если не используется опция **nowait**. Кроме того, **flush** вызывается для переменной, участвующей в операции, ассоциированной с директивой **atomic**.

В OpenMP предусмотрены функции для работы с системным таймером. Функция **omp_get_wtime()** возвращает астрономическое время в секундах, прошедшее от некоторой точки отсчета (гарантируется, что за время существования процесса значение данной точки отсчета не изменится):

double omp_get_wtime(void)

Таймеры нитей могут быть не синхронизированы между собой и выдавать различные значения. Функция **omp_get_wtick()** возвращает разрешение таймера в секундах:

double omp_get_wtick(void)

Данные функции можно использовать для измерения времени выполнения различных участков программы.

Технология OpenMP в силу своей простоты и возможности инкрементального распараллеливания является привлекательной для написания программ для систем с общей памятью. Для получения эффективной параллельной программы необходимо обеспечить равномерную загрузку всех нитей и отсутствие дополнительных задержек, связанных с синхронизацией. OpenMP может использоваться совместно с другими технологиями параллельного программирования, например, с MPI. В этом случае MPI обеспечивает распределение вычислений на несколько вычислительных узлов, а OpenMP используется для распараллеливания на одном узле.

Программирование на графических процессорах (Graphical Processor Unit, GPU).

В настоящее время все более распространенным становится использование графических процессоров в качестве основной вычислительной платформы. Особенности данной архитектуры позволяют существенно ускорить расчеты во многих численных моделях. Наиболее распространенной технологией программирования на графических процессорах является среда CUDA, которая представляет собой расширение языка ANSI C, включающее набор ключевых слов и дополнительные типы данных. Программы для CUDA компилируются при помощи команды **nvcc**. В рамках среды CUDA предполагается, что вычислительная система состоит из центрального процессора (Central Processor Unit, CPU-host), а также одного или нескольких массивно-параллельных специализированных устройств (GPU-device). Программа, написанная с использованием CUDA, представляет собой последовательность инструкций, предназначенных для выполнения как на центральном процессоре, так и на графическом устройстве. Вводимые в CUDA расширения языка C включают (Боресков, 2010):

- спецификаторы функций, показывающие, где будет выполняться функция и откуда она может быть вызвана;
- спецификаторы переменных, задающие тип памяти, используемой для данных переменных;
- директиву, служащую для запуска ядра и задающую как данные, так и иерархию нитей;
- встроенные переменные, содержащие информацию о текущей нити;
- дополнительные типы данных.

Вычисления, выполняемые параллельно на GPU, описываются функциями-ядрами, которые определяют инструкции для каждой отдельной нити. Поскольку все нити выполняют общий код, то CUDA можно отнести к модели SIMD. При этом создание и планировка работы большого числа нитей не требует значительных ресурсов, в отличие от

инициализации процессов в MPI. Все нити при выполнении ядра объединены в отдельные блоки, которые в свою очередь организованы в виде сетки. В общем случае сетка представляет собой двумерный массив блоков, а каждый блок – трехмерный массив нитей. Максимально возможное число нитей в каждом блоке зависит от архитектуры устройства (512 – для архитектуры версии 1.2-1.3 и 1024 – для версии 2.0). Для индексации нитей в ядрах используются встроенные переменные **blockIdx** – индекс блока в сетке и **threadIdx** – индекс нити в блоке. Размерность блоков определяется переменной **blockDim**, а размерность сетки – переменной **gridDim**. Встроенные переменные принадлежат к введенному расширением типу **dim3**, представляющему структуру с полями *x*, *y*, *z* и дополнительно определенными конструкторами. Значения данных переменных позволяют распределить вычисления между различными нитями графического процессора. Конкретная конфигурация вычислительной сетки определяется при запуске ядер.

В приведенном ниже примере показано определение сетки с помощью переменных **gridDims**, **blockDims** и запуск функции ядра:

```
dim3 gridDims( 1024, 1 );
```

```
dim3 blockDim( 256, 1, 1 );
```

```
kernel_function<<< gridDims, blockDim >>>( ... );
```

Переменная **gridDims** определяет сетку, состоящую из 1024 блоков размерности **blockDims**, каждый из которых объединяет 256 нитей.

Конфигурация сетки может быть задана до вызова ядра по значениям переменных, известных во время выполнения. Для объявления функций ядер используется спецификатор **__global__** непосредственно перед названием функции, свидетельствующий о том, что функция выполняется на графическом устройстве и вызывается из кода хоста с заданной вычислительной сеткой. Помимо **__global__** определен спецификатор **__device__** для функций, вызываемых из ядра или из других функций **__device__**. Спецификатор **__host__** служит для обозначения традиционных функций языка C, выполняемых на центральном процессоре. Спецификаторы **__host__** и **__device__** могут быть использованы вместе, т.е. соответствующая функция может выполняться как на GPU, так и на центральном процессоре, а код для обеих платформ при этом будет автоматически сгенерирован компилятором.

В качестве примера ниже приведется простейшее ядро для выполнения на графическом процессоре поэлементного умножения двух векторов:

```
__global__ void kernel_function( float* a, float* b, float* c, int n )
{
    int idx = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
    c[ idx ] = a[ idx ] * b[ idx ];
}
```

Здесь индекс элемента *idx* в массиве вычисляется по координате блока (**blockIdx.x**) и координате нити в блоке (**threadIdx.x**).

Синхронизации нитей одного блока в ядре достигается за счет функции **__syncthreads()**. Каждый блок представляет собой полностью независимый набор взаимодействующих между собой нитей, причем нити из разных блоков не могут взаимодействовать между собой. Таким образом, исходная задача (применение ядра к входным данным) разбивается на ряд подзадач, каждая из которых решается абсолютно независимо (т.е. никакого взаимодействия между подзадачами нет) и в произвольном порядке. Сама же подзадача решается при помощи набора взаимодействующих между

собой нитей. Подобная иерархия дает возможность контролировать степень взаимодействия нитей и дополнительные расходы на синхронизацию вычислений.

Графические процессоры имеют отдельное адресное пространство памяти с центральным процессором. Большинству реальных приложений необходимы операции выделения и освобождения памяти, а также функции обмена данными между центральным процессором и графическими процессорами. Семейство функций для этих целей предоставляется посредством CUDA API. Наиболее простым способом выделения и освобождения линейной памяти на устройстве являются функции **cudaMalloc(void**, size_t)** и **cudaFree(void*)**. Данные функции управляют выделением памяти на GPU, к которой CPU не имеет непосредственного доступа. Поэтому API предоставляет функции копирования памяти, которые позволяют копировать память как между CPU и GPU, так и в пределах GPU: **cudaMemcpy(void*, void*, size_t, enum cudaMemcpyKind)**, а также дополнительные функции асинхронного копирования данных. Последний параметр определяет тип копирования памяти и принимает одно из следующих значений: **cudaMemcpyHostToHost**, **cudaMemcpyHostToDevice**, **cudaMemcpyDeviceToHost**, **cudaMemcpyDeviceToDevice**. В рамках CUDA 4.0 добавлена возможность прямого копирования памяти между двумя графическими процессорами.

Модель памяти CUDA. Работа с глобальной памятью (DRAM) характеризуется достаточно низкой производительностью. Для сокращения издержек, связанных с чтением и записью из глобальной памяти, в CUDA представлена широкая иерархия типов доступной памяти (табл. 4.2.1). Регистры и общая (shared) память, расположенная на чипе, обладают большой скоростью записи и чтения. Регистры выделяются отдельным нитям, а общая память доступна всем нитям отдельного блока.

Табл. 4.2.1. Типы памяти в CUDA (Боресков, 2010).

Тип памяти	Доступ	Область видимости	Скорость работы
регистры	чтение/запись	нить	высокая (chip)
локальная	чтение/запись	нить	низкая (DRAM)
общая	чтение/запись	блок	высокая (chip)
глобальная	чтение/запись	сетка	низкая (DRAM)
константная	чтение	сетка	высокая (chip L1 cache)
текстура	чтение	сетка	высокая (chip L1 cache)

Для объявления переменной, общей для всех нитей блока, используется спецификатор **__shared__**. Возможно также динамическое выделение общей памяти на этапе выполнения посредством указания спецификатора **extern __shared__** при объявлении переменной в ядре и указании размерности при запуске ядра в функции хоста. Константная память, доступная для чтения и записи посредством API из кода хоста, а

также – для чтения из кода устройства, обладает малой латентностью. Спецификатор **constant** используется для объявления константной памяти и должен быть расположен вне тела функции. Значения объявленной таким образом переменной доступно нитям всех блоков. Общий размер для объявления константной памяти ограничен (до 65536 байт).

Для снижения задержек, связанных с доступом к глобальной памяти, схема проведения вычислений в ядрах, как правило, сводится к следующему: копирование части глобальной памяти в быструю, проведение всех необходимых вычислений, запись результатов вычислений в глобальную память. Существенной особенностью при программировании в рамках такой модели является ограниченность ресурсов быстрой памяти. При увеличении запросов ядра на регистровую и общую память уменьшается число нитей, которые могут одновременно выполняться на одном мультипроцессоре. Важным для написания эффективных программ является учет некоторых особенностей глобальной памяти DRAM. К таким особенностям относится возможность более быстрого чтения и записи последовательных ячеек памяти. Если нити выполняют одну и ту же инструкцию обращения к глобальной памяти для последовательных ячеек, то возможно объединение запросов в один.

Ресурсы поточного мультипроцессора включают регистры, слоты блоков нитей и слоты нитей, которые динамически выделяются при выполнении программы. Таким образом, мультипроцессоры способны выполнять много блоков с малым числом нитей или несколько блоков большой размерности. Аналогичная ситуация для регистров: чем меньше регистров на нить, тем больше блоков на мультипроцессор. Оптимизация приложений, как правило, сводится к проверке различных конфигураций выполнения и способа распределения ресурсов графических процессоров. Более последовательный подход к оптимизации приложений под конкретную архитектуру рассматривается в работе (Ryoo et al., 2008).

Описание возможностей CUDA, примеры реализации задач и основные способы оптимизации можно найти в книгах (Боресков, 2010, Kirk and Hwu, 2010). Для организации вычислений на нескольких графических процессорах можно использовать как рассмотренные выше технологии программирования OpenMP и MPI, так и другие.

4.3. Реализация моделей на вычислительных системах с распределенной памятью

Пусть уравнения какой-либо геофизической модели записаны в следующем общем виде:

$$\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + A\vec{\varphi} = \vec{F}, \quad (4.3.1)$$

где $\vec{\varphi}$ – вектор состояния системы, A – оператор, отвечающий за трехмерную адвекцию, горизонтальную диффузию, а также включающий градиент давления и силу Кориолиса. Вектор правых частей $\vec{F}$ ответственен за «физический» блок, в котором рассчитываются источники и стоки вследствие процессов подсеточного масштаба (вертикальный турбулентный перенос, орографические и неорографические гравитационные волны, конвекция, радиация и др.). Оператор A представляет собой динамические, существенно трехмерные, процессы (так называемый «динамический» блок модели). Применяемые в геофизических моделях алгоритмы делятся на две группы: решения эволюционных уравнений и решения эллиптического уравнения для геопотенциала или давления. Для решения эволюционных уравнений, как правило, используются явные схемы «чехарда» и Адамса-Бэшфорта.

Важной особенностью «физического» блока является то, что он параметрическим образом зависит от горизонтальных координат. Это позволяет применить двумерное

разбиение расчетной области в горизонтальной плоскости и достичь высокой степени параллелизма без использования обменов данными между процессорами. Вместе с тем, для этого блока характерно значительное разнообразие арифметико-логических операций, которое включает аппроксимацию интегралов конечными суммами и вычисление большого количества элементарных функций при расчете радиационных притоков, логические «переключения» при вычислении фазовых переходов в почвенном блоке и расчете конвективных процессов и осадкообразования в атмосфере и др.

В конечно-разностном динамическом блоке вычисления на каждом шаге по времени имеют следующую общую структуру (Глухов, 2003): расчет явных динамических тенденций в уравнении (4.3.1), вычисление правой части эллиптического уравнения, решение этого уравнения, добавление к прогностическим полям вклада за счет динамических тенденций, пространственная и временная фильтрация прогностических величин.

В климатических моделях процессы упорядочиваются в двумерную декартову топологию размеров $P_x \times P_y$ с периодической размерностью P_x . Вычислительная область равномерно делится на P_x подобластей вдоль долготы и P_y – вдоль широты (рис. 4.3.1, основное распределение). Топология, в свою очередь, делится на одномерные зональные и меридиональные подгруппы вдоль долготы и широты, соответственно. Перед вычислением явных динамических тенденций процессы обмениваются граничными значениями. При этом автоматически учитывается условие периодичности по долготе.

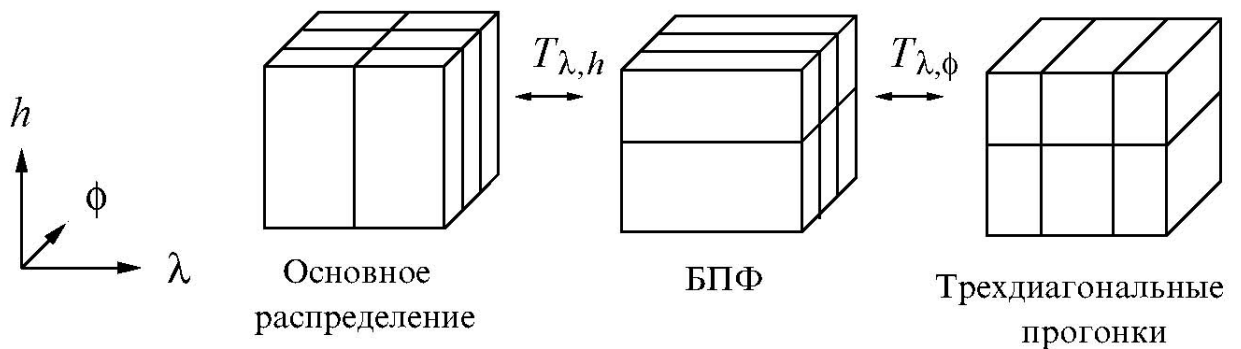


Рис. 4.3.1. Транспонирование данных в прямом методе решения уравнения Гельмгольца (случай $P_x = 2$, $P_y = 3$). Здесь λ – долгота, ϕ – широта, h – высота.

Для решения дискретного аналога эллиптического уравнения (уравнения Гельмгольца) может применяться прямой метод, основанный на быстром преобразовании Фурье вдоль долготы и трехдиагональных прогонках вдоль широты. Вычисления в этом случае проводятся в следующей последовательности: прямое преобразование Фурье по долготе, трехдиагональные прогонки по широте и обратное преобразование Фурье по долготе. Так как для вычисления прямого преобразования Фурье необходимы все значения правой части по долготе, а для прогонок – все коэффициенты Фурье по широте, то делается двойное транспонирование данных, изображенное на рис. 4.3.1. Сначала данные транспонируются в плоскости долгота – высота $T_{\lambda,h}$, затем в плоскости широта – долгота $T_{\lambda,\phi}$. После завершения прогонок и быстрого преобразования Фурье (БПФ) делаются обратные операции транспонирования, восстанавливающие исходное распределение данных по широте и долготе.

Похожие технологии используются в региональных и вихреразрешающих моделях. Решение конечно-разностного аналога эллиптического уравнения (уравнения Пуассона) также осуществляется в три этапа. На первом из них производится двумерное БПФ правой

части уравнения, затем осуществляются прогонки по вертикальной координате, далее к полученному решению применяется обратное БПФ.

Вычислительные алгоритмы геофизических моделей характеризуются локальной зависимостью вычислений от данных, что позволяет эффективно использовать декартово разбиение области расчета между параллельными процессами. При этом для вычисления прогностических переменных в каждой подобласти производится обмен данными только на границах с соседними подобластями (процессами). Объем обмениваемых данных пропорционален ширине шаблона разностной схемы. В случае центральных разностей на границах подобластей необходимо обменивать сечения массива шириной 1. Необходимо заметить, что при разбиении расчетной области между процессами каждый из них хранит только блоки массивов, находящиеся в его подобласти. Это снимает ограничение на размер расчетной сетки, определяемое объемом оперативной памяти одного процессора.

С точки зрения эффективности важным является выбор размерности разбиения. Показано (Danilikin and Starchenko, 2008) что двумерное и трехмерное разбиение позволяют получить большее ускорение, чем одномерное. В то же время, трехмерное разбиение не дает существенного выигрыша по сравнению с двумерным XU -разбиением даже в задачах, в которых размер сетки по вертикальной координате сравним с размером по горизонтальным координатам (Глазунов, 2007). Поэтому для параллельной реализации региональной модели целесообразно использовать XU -разбиение.

Для фильтрации вычислительной моды схемы «чехарда» используется фильтр Асселина по времени, который не требует обмена данными между процессами. Фильтрация ложных волн, возникающих из-за нелинейной неустойчивости, производится пространственным фильтром, размер шаблона которого вдоль каждой из координат равен 5. Это приводит к необходимости обмена на границе подобластей сечениями массивов шириной 2. В результате, схема обменов принимает вид, изображенный на рис. 4.3.2.

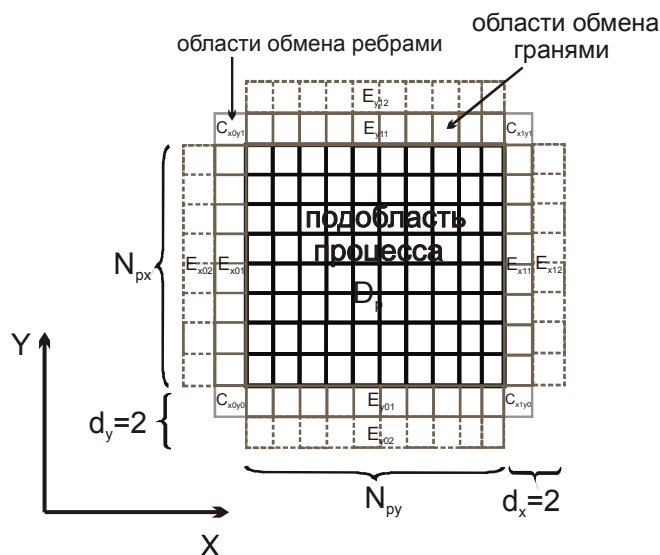


Рис. 4.3.2. Схема обменов данными процесса с процессами-соседями при XU -разбиении области.

Параллельная реализация быстрого преобразования Фурье включает транспонирование массивов, которое может быть осуществлено двумя способами. Первый способ (рис. 4.3.3, верхний ряд) заключается в том, что исходное XU -разбиение массива между процессами транспонируется в σ -разбиение (σ – вертикальная координата модели), а затем в каждом горизонтальном слое σ -разбиения соответствующий процесс производит БПФ по последовательному алгоритму. Второй способ учитывает (рис. 4.3.3, нижний ряд), что двумерное БПФ реализуется как последовательность одномерных БПФ по координатам x и y . Характеристики двух способов приведены в таблице 4.3.1 (N_x, N_y, N_σ –

размерности расчетной сетки, N_{px}, N_{py} – количество процессов по соответствующим осям).

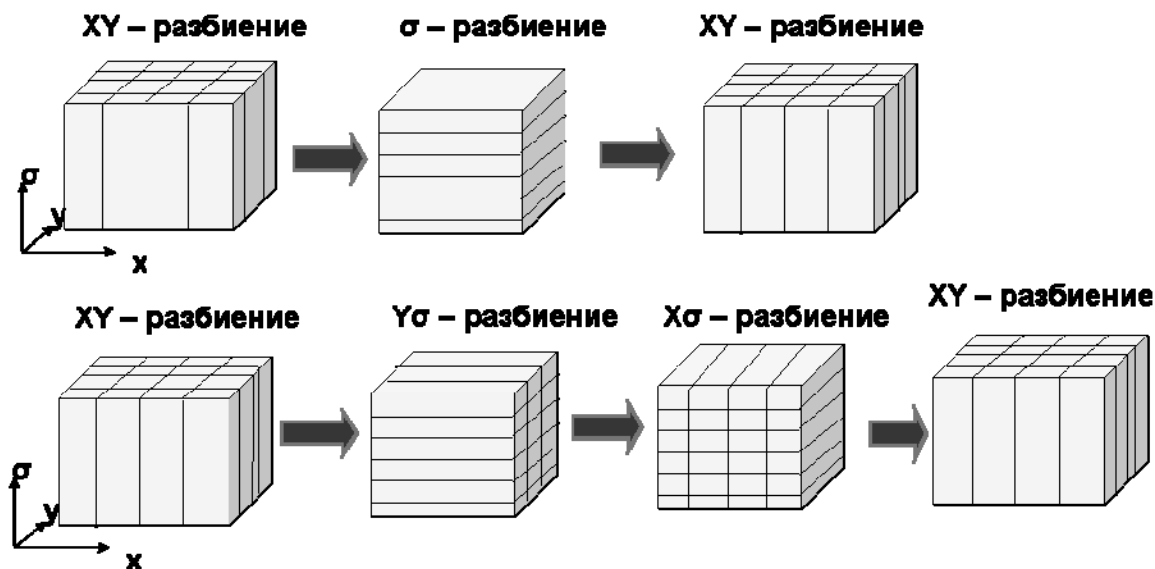


Рис. 4.3.3. Две схемы транспонирования массивов в параллельной реализации двумерного БПФ.

Табл. 4.3.1. Характеристики двух схем транспонирования массивов в параллельной реализации двумерного БПФ.

Схема	Общее количество посылаемых и получаемых сообщений на каждом процессе	Общее количество посылаемых и получаемых элементов на каждом процессе	Ограничение на количество процессов
1-й способ	$4N_{px}N_{py}$	$4N_xN_yN_\sigma / (N_{px}N_{py})$	$N_{px}N_{py} < N_\sigma$
2-й способ	$2(2N_{px} + N_{py})$	$6N_xN_yN_\sigma / (N_{px}N_{py})$	$N_{px} = N_{py} < N_\sigma$

Из таблицы видно, что общий объем пересылаемых элементов больше для второго способа, но при этом общее количество сообщений в нем существенно меньше. Эти два обстоятельства не позволяют без эксперимента сравнить время выполнения двух описанных подходов. В то же время, важным аргументом в пользу второго способа является то, что для него существенно слабее ограничение на возможное количество процессов (в первом методе общее количество процессов ограничивается количеством σ -уровней модели, которое в региональных атмосферных моделях составляет пока всего несколько десятков).

Поскольку каждый параллельный процесс адресует свою и только свою память, то любая распределенная величина должна храниться каждым процессом в определенных массивах, размеры которых могут уменьшаться динамически с увеличением количества параллельных процессов. Трехмерные величины хранятся в массивах, размерности которых соответствуют размерностям физического пространства. В программном коде климатических моделей младший индекс массива, как правило, отвечает высоте, следующий – долготе, и, наконец, последний – широте. При таком упорядочивании данных основная часть вычислений производится во вложенных циклах, индексы которых

соответствует широте, долготе и высоте, причем цикл по широте является внешним, а по высоте – внутренним. Обмен данными между процессами осуществим посредством вызова ими коммуникационных процедур, например, стандартных процедур MPI.

Более рационален подход, связанный с созданием универсальных коммуникационных процедур более высокого уровня, обращающихся к процедурам MPI, и выделением их в отдельную библиотеку, доступную различным приложениям. В.Н. Глуховым (Глухов, 2003) разработана библиотека ParLib, процедуры которой написаны на языке C, обращаются к стандартным функциям MPI и имеют интерфейс, позволяющий вызывать их как программами на C, так и программами на Фортране. Потенциально библиотека применима для распараллеливания достаточно широкого класса краевых задач математической физики, решаемых на регулярных сетках, в которых распараллеливание достигается декомпозицией расчетной области по одной или нескольким независимым пространственным переменным. К этому классу не принадлежат задачи, решаемые на неструктурированных сетках и использующие списочный формат для хранения многомерных величин. Для использования библиотеки необходимо, чтобы данные хранились в многомерных массивах, размерности которых соответствовали бы размерностям физического пространства или различным физическим переменным, а декомпозиция расчетной области была бы реализована как декомпозиция соответствующих размерностей этих массивов.

Библиотека ParLib осуществляет две наиболее типичные коммуникационные операции: обмены граничными значениями и транспонирование данных. Обмены граничными значениями необходимы в тех случаях, когда для вычисления значений распределенной величины в какой-либо точке необходимы ее значения или же значения других распределенных величин из некоторой окрестности этой точки. Типичным примером является вычисление производной в направлении распределенной физической размерности методом конечных разностей. В тех случаях, когда процессу необходимы все значения вдоль некоторой распределенной размерности и существует нераспределенная размерность, по которой вычисления независимы, данные можно перераспределить (транспонировать) таким образом, что вторая размерность станет распределенной, а первая – нераспределенной. Основными достоинствами библиотеки ParLib можно считать следующие: универсальность (возможность использования несколькими различными приложениями), переносимость (библиотека поддерживает стандарт MPI), эффективность (асинхронные пересылки, возможность перекрытия вычислений и коммуникаций).

4.4. Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений

После того, как в результате дискретизации дифференциальные уравнения задачи сведены к их конечно-разностным аналогам, возникает необходимость решать систему линейных уравнений вида:

$$Ax = b \quad (4.4.1)$$

с невырожденной матрицей A некоторого размера $n \times n$. Прямые методы решения этой системы, как правило, сводятся к построению факторизации матрицы $A = VK$, где V и K имеют структуру, упрощающую решение вспомогательных систем с матрицами V и K . Факторизацией матрицы A , лежащей в основе гауссова исключения, является разложение $A = LU$, где L – нижняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали, а U – верхняя треугольная матрица. Тогда задача сводится к решению треугольных систем:

$$Ly = b, \quad Ux = y. \quad (4.4.2)$$

Процесс их решения называется прямой и обратной подстановками. Если A – симметричная положительно определенная матрица, то часто используемой альтернативой гауссову исключению является разложение Холецкого

$$A = LL^T, \quad (4.4.3)$$

где L – нижняя треугольная матрица.

Другим распространенным способом факторизации матрицы A является представление

$$A = QR, \quad (4.4.4)$$

где Q – ортогональная, а R – верхняя треугольная матрицы. Существуют два распространенных подхода к вычислению разложения (4.4.4): преобразования Хаусхолдера и преобразования Гивенса (Тыртышников, 2006). Для последовательных компьютеров требуется $O(4n^3/3)$ операций, чтобы найти разложение (4.4.4) с помощью преобразований Хаусхолдера, и $O(2n^3)$ – при использовании преобразований Гивенса (в число операций включаются как умножения/деления, так и сложения/вычитания). Такие методы приблизительно вдвое и втрое медленней, чем LU -разложение. Известно, что они численно устойчивы без какого-либо переупорядочения строк, однако это не перевешивает преимущества, которое имеет LU -разложение (даже с выбором главного элемента) в отношении числа операций. Поэтому ортогональные методы редко используются на последовательных компьютерах для решения невырожденных систем уравнений.

Существуют и другие способы факторизации (Тыртышников, 2006), приводящие к удобным для решения системам, в том числе и достаточно необычные методы для параллельных вычислений – например, так называемый QIF -метод (QIF – сокращение от Quadrant Interlocking Factorization), рассмотренный в работе (Shanehchi and Evans, 1982). Основная идея метода состоит в том, чтобы проводить исключение в матрице как сверху вниз, так и снизу вверх. Разложения (4.4.4), как правило, применяются при решении достаточно специализированных задач, или являются основой при построении более сложных методов. Особенности построения QR -разложений, в том числе для параллельных архитектур, методом Хаусхолдера и метода Гивенса рассматриваются в работах (Golub et al., 1986, Dongarra et al., 1986) и др.

Алгоритмы LU -факторизации. Целесообразно вначале рассмотреть вопрос построения LU -разложения, занимающего большую часть времени всего вычислительного процесса. Можно выписать псевдокод разложения для строчного хранения матрицы A :

$$\begin{aligned} &\text{для } k = 1 \text{ до } n-1 \\ &\quad \text{для } i = k+1 \text{ до } n \\ &\quad \quad l_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \\ &\quad \quad \text{для } j = k+1 \text{ до } n \\ &\quad \quad \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj} \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

Правая часть b системы (4.4.1) также может обрабатываться в ходе приведения к треугольному виду, благодаря чему осуществляется этап прямой подстановки в равенствах (4.4.2). Если A хранится по строкам, то полезно присоединить b_i к i -й строке, если это позволяет память. В таком случае в цикле j (4.4.5) верхняя граница

увеличивается до $n+1$, а длины векторов возрастают на единицу. Если A хранится по столбцам, то алгоритм LU -разложения изменяется следующим образом:

$$\begin{aligned}
 &\text{для } k=1 \text{ до } n-1 \\
 &\quad \text{для } s=k+1 \text{ до } n \\
 &\quad \quad l_{sk} = a_{sk} / a_{kk} \\
 &\quad \quad \text{для } j=k+1 \text{ до } n \\
 &\quad \quad \quad \text{для } i=k+1 \text{ до } n \\
 &\quad \quad \quad \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj}
 \end{aligned} \tag{4.4.6}$$

Подробно вопросы организации циклов вида (4.4.5) и (4.4.6), а также зависимость порядка вычислений от типа вычислительной архитектуры, рассматриваются, например, в работе (Dongarra et al., 1984).

Обобщением приведенного подхода являются способы организации вычислений, основанные на операциях с подматрицами. Потенциально они проще реализуются и облегчают написание переносимых программ. В основе простейшего из этих способов организации лежит идея окаймления. Пусть A_j – ведущая главная подматрица порядка j в матрице A , и пусть известно разложение $L_{j-1}U_{j-1}$ подматрицы A_{j-1} . Тогда для подматрицы A_j можно написать следующее разложение:

$$\begin{bmatrix} L_{j-1} & 0 \\ l_j & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{j-1} & u_j \\ 0 & u_{jj} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{j-1} & a_j \\ \hat{a}_j & a_{jj} \end{bmatrix},$$

где l_j и $\hat{a}_j$ – векторы-строки, а u_j и a_j – векторы-столбцы. Это приводит к соотношениям

$$L_{j-1}u_j = a_j, \quad l_j U_{j-1} = \hat{a}_j, \quad l_j u_j + u_{jj} = a_{jj}. \tag{4.4.7}$$

Таким образом, векторы u_j и l_j можно вычислить, решая нижне-треугольные системы

$$L_{j-1}u_j = a_j, \quad U_{j-1}^T l_j^T = \hat{a}_j^T,$$

после чего u_{jj} определяется из третьего равенства (4.4.7).

Существуют два естественных способа реализации окаймления в LU -разложении. В первом варианте треугольные системы решаются с помощью столбцового алгоритма:

$$\begin{aligned}
 &\text{Для } j=2 \text{ до } n \\
 &\quad \text{Для } k=1 \text{ до } j-2 \\
 &\quad \quad \text{Для } i=k+1 \text{ до } j-1 \\
 &\quad \quad \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj} \\
 &\quad \quad \quad \text{Для } k=1 \text{ до } j-1 \\
 &\quad \quad \quad \quad l_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \\
 &\quad \quad \quad \quad \text{Для } i=k+1 \text{ до } j \\
 &\quad \quad \quad \quad \quad a_{ji} = a_{ji} - l_{jk} a_{ki},
 \end{aligned} \tag{4.4.8}$$

а во втором – с помощью алгоритма скалярных произведений:

$$\begin{aligned}
& \text{для } i = 2 \text{ до } n \\
& \quad \text{для } j = 2 \text{ до } i \\
& \quad \quad l_{i,j-1} = a_{i,j-1} / a_{j-1,j-1} \\
& \quad \quad \text{для } k = 1 \text{ до } j-1 \\
& \quad \quad \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj} \\
& \quad \quad \quad \text{для } j = 2 \text{ до } i-1 \\
& \quad \quad \quad \text{для } k = 1 \text{ до } j-1 \\
& \quad \quad \quad \quad a_{ji} = a_{ji} - l_{jk} a_{ki}.
\end{aligned} \tag{4.4.9}$$

Основная работа в алгоритмах окаймления приходится на решение треугольных систем (4.4.8). Это – матрично-векторные операции, которые можно реализовать в виде подпрограмм, добиваясь в них максимальной для данной вычислительной системы эффективности.

Другой способ организации вычислений, рассмотренный в работе (Dongarra, Eisenstat, 1984), имеет то преимущество, что его основной операцией является матрично-векторное умножение. Математически алгоритм можно описать следующим образом. Пусть матрицы A , L и U разбиты на блоки в соответствии с равенством

$$\begin{bmatrix} A_{11} & a_{12} & A_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ A_{31} & a_{32} & A_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ L_{31} & l_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & u_{12} & U_{13} \\ 0 & u_{23} & u_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix}. \tag{4.4.10}$$

Здесь a_{21} , a_{23} , l_{21} и u_{23} – векторы-строки, а a_{12} , a_{32} , l_{32} и u_{12} – векторы-столбцы. Предполагается, что матрица A_{11} разложена в произведение $L_{11}U_{11}$ и что l_{21} , L_{31} , u_{12} и U_{13} известны. На очередном шаге требуется вычислить l_{32} , следующий столбец матрицы L , а также u_{22} и u_{23} , составляющие следующую строку в U . Приравнявая в (4.4.10) одинаково расположенные элементы, можно получить:

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}, \quad u_{23} = a_{23} - l_{21}U_{13}, \quad l_{32} = (a_{32} - L_{31}u_{12}) / u_{22}. \tag{4.4.11}$$

Основной операцией в (4.4.11) является умножение вектора на прямоугольную матрицу. Такие умножения можно реализовать посредством скалярных произведений или линейных комбинаций, что приводит к двум различным формам алгоритма. Потенциальное преимущество алгоритма Донгарры–Айзенштата заключается в том, что в некоторых векторных компьютерах матрично-векторные умножения выполняются весьма эффективно. Обобщение данного алгоритма на блочный случай приводится в статье (Salahan, 1986), где основной операцией является матрично-матричное умножение.

Параллельные алгоритмы LU -факторизации. Пусть имеется вычислительная система с распределенной памятью и числом процессоров $p = n$. Тогда один из возможных вариантов организации LU -разложения выглядит так. Пусть i -я строка матрицы A хранится на процессоре i . На первом шаге первая строка рассылается всем процессорам, после чего вычисления

$$l_{i1} = a_{i1} / a_{11}, \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{i1}a_{1j}, \quad j = 2, \dots, n, \tag{4.4.12}$$

могут выполняться параллельно процессорами $P_2, \dots, P_n$. На втором шаге вторая строка приведенной матрицы рассылается из процессора P_2 процессорам $P_3, \dots, P_n$, а затем проводятся параллельные вычисления, и т. д. Следует отметить два главных недостатка этого подхода: значительный объем обмена данными между каждыми двумя шагами и уменьшение на 1 числа активных процессоров на каждом шаге.

Альтернативой хранению по строкам является вариант, в котором i -й столбец матрицы A хранится на процессоре i . В этом случае на первом шаге все множители l_{i1} вычисляются в процессоре 1 и рассылаются остальным процессорам. Затем процессорами $2, \dots, n$ параллельно производятся модификации

$$a_{ij} = a_{ij} - l_{i1}a_{1j}, \quad j = 2, \dots, n. \quad (4.4.13)$$

Вычислив множители l_{i1} , процессор 1 прекращает работу и с каждым шагом число простаивающих процессоров увеличивается на единицу. Возникает та же проблема балансировки нагрузки, что и в строчно ориентированном алгоритме.

В более реалистичной ситуации, когда $p \leq n$, проблема балансировки нагрузки в известной степени смягчается. Пусть $n = kp$ и применяется хранение по строкам. В блочной схеме хранения данных первые k строк матрицы A помещаются в память процессора 1, следующие k строк – в память процессора 2, и т. д. Снова первая строка рассылается из процессора 1 остальным процессорам, а затем выполняются вычисления (4.4.12), однако теперь это делается блоками по k наборов операций на каждом процессоре. Как и прежде, в ходе приведения все большее число процессоров становятся бездействующими, однако отношение общего времени вычислений ко времени обменов и времени простоев является возрастающей функцией от k . Неравномерность похожего типа возникает и в том, вполне вероятном, случае, когда n не кратно числу процессоров.

Более привлекательна циклическая слоистая схема хранения (O'Leary and Stewart, 1985), в которой строки, распределенные на разные процессоры, как бы «прославляют» друг друга. Пусть по-прежнему $n = kp$, а строки $1, p+1, 2p+1, \dots$ хранятся на процессоре 1, строки $2, p+2, 2p+2, \dots$ – на процессоре 2, и т. д. Тот же принцип прославивания можно использовать при хранении по столбцам. Вариантом строчной (или столбцовой) циклической схемы является слоистая схема с отражениями. В общем случае первые p строк распределяются между p процессорами в естественном порядке, следующие p строк распределяются в обратном порядке, и т. д.

В алгоритме LU -разложения с использованием циклической слоистой схемы хранения в локальной памяти на первом шаге аннулируются элементы первого столбца. Если процесс ведется обычным последовательным образом, то вычисляются множители l_{i1} , модифицируются соответствующие строки, а затем начинается второй шаг. В начале этого шага процессор, хранящий вторую строку, должен переслать ее остальным процессорам. Следовательно, возникает задержка на время этой пересылки. Очевидным выходом из положения является немедленная рассылка процессором 2 модифицированной второй строки, как только эта строка приняла окончательный вид. Такая стратегия называется опережающей рассылкой. Если можно совместить вычисления и обмены, то все процессоры будут заняты модификациями первого шага, пока идет рассылка. То же самое будет происходить и на других шагах: на k -м шаге $(k+1)$ -я строка рассылается сразу после того, как окончится ее модификация. Насколько выгодна эта стратегия для конкретной вычислительной системы, зависит от топологии ее межпроцессорных связей.

Стратегию опережающей рассылки можно использовать и в системах с распределенной памятью. Здесь при прямолинейной реализации потребовалась бы

синхронизация после каждого шага с тем, чтобы ни один процессор не начинал следующий шаг, пока не все процессоры закончили текущий. На k -м шаге процессор, которому приписана $(k+1)$ -я строка, имеет не меньше работы, чем любой другой процессор, поскольку обрабатывает по крайней мере столько же строк. Поэтому другим процессорам, возможно, придется ждать, пока не завершит работу данный процессор, прежде чем можно будет начать следующий шаг. Стратегия опережающей рассылки, которую теперь следует называть стратегией опережающего вычисления, меняет порядок действий, маркируя $(k+1)$ -ю строку, как только ее модификация закончена, признаком «готова». Теперь другие процессоры, завершив свою работу на k -м шаге, могут немедленно приступить к $(k+1)$ -му шагу, если $(k+1)$ -я строка отмечена признаком «готова». Маркировка помогает осуществлять необходимую синхронизацию без неоправданных задержек. Опережающую рассылку и опережающее вычисление называют еще конвейеризацией. Интересные особенности построения LU -разложения на различных параллельных системах приводятся в работе (Saad, 1986).

Решение треугольных систем. После выполнения LU -разложения или разложения Холецкого нужно решать треугольные системы уравнений. Можно рассмотреть только верхнюю треугольную систему $Ux = c$; решение нижней треугольной системы организуется аналогичным образом. К основным методам относится столбцовый алгоритм:

$$\begin{aligned} &\text{для } j = n \text{ с шагом } -1 \text{ до } 1 \\ &\quad x_j = c_j / u_{jj} \\ &\quad \text{для } i = 1 \text{ до } j-1 \\ &\quad \quad c_i = c_i - x_j u_{ij} \end{aligned} \quad (4.4.14)$$

и алгоритм скалярных произведений:

$$\begin{aligned} &\text{для } i = n \text{ с шагом } -1 \text{ до } 1 \\ &\quad \text{для } j = i+1 \text{ до } n \\ &\quad \quad c_i = c_i - u_{ij} x_j \\ &\quad \quad x_i = c_i / u_{ii} \end{aligned} \quad (4.4.15)$$

Если считать, что треугольная система является результатом проведенного ранее LU -разложения или разложения Холецкого, то способ хранения U в системах с локальной памятью уже предопределен схемой, использовавшейся при разложении. Так, если применялась строчная циклическая слоистая схема, то таким же слоистым образом по строкам будет храниться матрица U . Предполагая, что и правая часть c распределена по слоям, то тогда на первом шаге c_n и u_{nn} находятся на одном и том же процессоре. Одна из возможных реализаций столбцового алгоритма для матрицы U , хранимой по строкам, состоит в следующем (Ortega, 1988):

$$\begin{aligned} &\text{вычислить } x_n = c_n / u_{nn} \text{ в } P(n), \\ &\text{разослать } x_n \text{ всем процессорам,} \\ &\text{вычислить } c_i = c_i - u_{in} x_n, \quad i = 1, \dots, n-1, \\ &\text{вычислить } x_{n-1} = c_{n-1} / u_{n-1, n-1} \text{ в } P(n-1), \\ &\text{разослать } x_{n-1} \text{ всем процессорам,} \\ &\text{вычислить } c_i = c_i - u_{i, n-1} x_{n-1}, \quad i = 1, \dots, n-2, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (4.4.16)$$

После того как значение x_n переслано остальным процессорам, каждый процессор пересчитывает хранящиеся в нем компоненты правой части. Затем на процессоре,

содержащем $(n-1)$ -ю строку, вычисляется x_{n-1} . В результате повторения этого процесса вычисляется x_{n-2} , потом x_{n-3} , и т. д. При перевычислении величин c_i процессоры загружены равномерно до тех пор, пока треугольная система не редуцируется до малого размера. На заключительных же шагах все большее число процессоров прекращают работу.

Недостаток столбцового алгоритма (4.4.16) заключается в том, что когда какой-то процессор вычисляет x_i , то остальные процессоры простаивают. Можно попытаться совместить вычисление последующих значений x_i , применяя стратегию опережения: процессор, содержащий $(n-1)$ -ю строку, модифицирует c_{n-1} , а затем, прежде чем модифицировать другие c_i , вычисляет и рассылает x_{n-1} . Следовательно, значение x_{n-1} будет доступно всякому процессору в тот момент, когда он готов приступить к следующей модификации. Процессор, вычисливший x_{n-1} , закончит свои модификации первого шага позже других процессоров, но это отставание постепенно будет ликвидировано, поскольку при вычислении следующих значений x_i каждый процессор по очереди претерпит аналогичную задержку.

Если U хранится в соответствии со столбцовой циклической слоистой схемой, то прямолинейная реализация столбцового алгоритма приводит по существу к последовательной программе. Пусть в памяти процессора $P(n)$, содержащей последний столбец матрицы U , хранится также и вектор c . Тогда $P(n)$ вычисляет x_n , пересчитывает c и пересылает новый вектор c процессору $P(n-1)$. Тот вычисляет x_{n-1} , модифицирует вектор c , пересылает его процессору $P(n-2)$, и т. д. Таким образом, в каждый момент времени вычисления производит лишь один процессор. Можно в какой-то мере поправить положение с помощью различных стратегий опережения. Однако целесообразно перейти к рассмотрению алгоритма скалярных произведений, поскольку при хранении U по столбцам он потенциально более привлекателен.

В алгоритме скалярных произведений (4.4.15) вычисление значения x_i включает в себя скалярное произведение i -й строки матрицы U , исключая диагональный элемент, и вектора с компонентами $x_{i+1}, \dots, x_n$. Пусть эти компоненты уже вычислены и $x_j \in P(j)$. Тогда процессор $P(j)$ может вычислить часть суммы $\sum u_{ij}x_j$, отвечающую хранящимся в его памяти значениям x_j , поскольку соответствующие u_{ij} также находятся в $P(j)$. После того как эти частичные скалярные произведения вычислены всеми процессорами параллельно, их можно просуммировать методом сдваивания, а результат поместить в $P(i)$. Если предположить, что правая часть хранится таким образом, что $c \in P(i)$, то в таком случае $P(i)$ вычисляет x_i . Параллельный алгоритм скалярных произведений можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\text{для } i = n \text{ с шагом } -1 \text{ до } 1 \\ &\quad \text{все процессоры вычисляют свою порцию} \\ &\quad i\text{-го скалярного произведения;} \\ &\quad \text{после сложения частичных скалярных произведений} \\ &\quad \text{методом сдваивания сумма находится в } P(i); \\ &\quad P(i) \text{ вычисляет } x_i. \end{aligned} \tag{4.4.17}$$

При больших n и i на этапе вычисления частичных скалярных произведений параллелизм почти идеален. Этап сдваивания не так хорош: он характеризуется обменами и возрастающим числом процессоров, прекративших работу. Кроме того, на первых

шагах, когда i близко к n , параллелизм невелик и при вычислении частичных скалярных произведений. Некоторые из названных проблем в принципе можно смягчить, применяя стратегии опережающего вычисления. Например, на j -м шаге процессор $P(j)$, закончив свои вычисления, предусмотренные этим шагом, может сразу начинать накапливание частичного скалярного произведения для следующего шага. Следует заметить, что в системах с локальной памятью задаче решения треугольных систем внутренне присуща трудность, связанная с тем, что расходы на обмены амортизируются на сравнительно небольшом количестве $O(n^2)$ арифметических операций по сравнению с $O(n^3)$ операций при разложении.

Выполнив разложение Холецкого, необходимо решать треугольные системы $Ly = b$ и $L^T x = y$. Если исходная матрица A хранится по строкам, то таким же образом будет храниться и L . Для системы $Ly = b$ можно использовать столбцовый алгоритм, аналогичный алгоритму (4.4.14). Единственное отличие будет состоять в том, что неизвестные теперь определяются в порядке $y_1, \dots, y_n$. При решении системы $L^T x = y$ хранению матрицы L по строкам соответствует хранение L^T по столбцам. Если же A хранилась по столбцам, то L будет храниться по столбцам, а L^T – по строкам. В любом случае потребуется решать треугольные системы и со строчной, и со столбцовой схемой хранения.

При применении гауссова исключения прямую подстановку (т. е. решение системы $Ly = b$) обычно выполняют как часть процесса факторизации. Если используется строчное хранение, то элементы вектора b могут быть дописаны к строкам A ; при хранении по столбцам b может рассматриваться как дополнительный столбец матрицы A .

Матрицы специальной структуры. Пусть матрица A – ленточного вида с симметричной лентой полушириной β . Псевдокод LU -разложения (4.4.5), адаптированный к системе с полушириной β , записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} &\text{для } k = 1 \text{ до } n-1 \\ &\quad \text{для } i = k+1 \text{ до } \min(k + \beta, n) \\ &\quad \quad l_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \\ &\quad \quad \text{для } j = k+1 \text{ до } \min(k + \beta, n) \\ &\quad \quad \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj} \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

Аналогичным образом, псевдокод (4.4.6) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} &\text{для } k = 1 \text{ до } n-1 \\ &\quad \text{для } s = k+1 \text{ до } \min(k + \beta, n) \\ &\quad \quad l_{sk} = a_{sk} / a_{kk} \\ &\quad \quad \text{для } j = k+1 \text{ до } \min(k + \beta, n) \\ &\quad \quad \quad \text{для } i = k+1 \text{ до } \min(k + \beta, n) \\ &\quad \quad \quad \quad a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj} \end{aligned} \quad (4.4.19)$$

В параллельной реализации LU -разложения ленточных матриц главный интерес представляет влияние ширины ленты на степень параллелизма. Для алгоритмов (4.4.18) и (4.4.19) степень параллелизма в модификациях внутреннего цикла на протяжении почти всего процесса равна β , т. е. совпадает с длиной векторов. В частности, при слоистом распределении строк между процессорами на первом шаге нужно будет исключать элементы первого столбца в строках $2, \dots, \beta+1$. Эти β строк могут обрабатываться

одновременно, если речь идет о форме kij ; в форме kji одновременно могут обрабатываться соответствующие столбцы. Таким образом, если β меньше числа p процессоров, то на первом шаге будут работать только процессоры $2, \dots, \beta+1$. Поэтому для полного использования всех процессоров необходимо, чтобы выполнялось $\beta \geq p$. Однако и при выполнении этого условия дисбаланс загрузки процессоров для ленточной системы гораздо более вероятен, чем для системы общего вида. Проблему неравномерной загрузки процессоров можно в известной мере снять, применив стратегию опережающего вычисления. Например, как только на k -м шаге модифицирована строка $k+1$, она рассылается остальным процессорам. Тогда, закончив свою работу на k -м шаге, процессор немедленно начинает $(k+1)$ -й шаг.

Поскольку степень векторизации или параллелизма в LU -разложении и разложении Холецкого зависит от ширины ленты матрицы, то особый интерес представляет разработка методов решения систем с узкой лентой, особенно трехдиагональных систем (Stone, 1975). Для трехдиагональных систем существует ряд специальных алгоритмов, например, алгоритм циклической редукции (Golub and van Loan, 1989). Другие методы для решения трехдиагональных систем приводятся, в частности, в работах (Heller et al., 1976, van der Vorst, 1986).

4.5. Итерационные методы

Во многих случаях при дискретизации дифференциальных уравнений численная задача сводится к решению системы линейных уравнений с разреженной матрицей. Применение прямых методов для таких задач часто оказывается неэффективным. Можно использовать другой подход, который состоит в построении последовательных приближений решения задачи. Существует большое разнообразие итерационных методов и их полное описание выходит за рамки данной книги. Ниже будут описаны лишь основные, имеющие непосредственное отношение к моделированию геофизических процессов, итерационные подходы и способы их реализации на параллельных архитектурах в приложении к простой модельной задаче из раздела (3.3).

Модельная задача. В качестве модельной задачи рассматривается уравнение Пуассона

$$u_{xx} + u_{yy} = f, \quad (4.5.1)$$

где $(x, y) \in \Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ и функция u задана на границе области Ω . Правая часть f представляет собой известную функцию от x и y . Вводится дискретизация единичного квадрата Ω с шагом по пространству h . Если обозначить через u_{ij} приближение к решению задачи (4.5.1) в точке (ih, jh) , принадлежащей сетке, то применив для аппроксимации производных в (4.5.1) обычные конечные разности второго порядка, можно получить следующую систему уравнений:

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{ij} = h^2 f_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, N), \quad (4.5.2)$$

где $(N+1)h = 1$. В предположении, что функция u задана на границе области, только N^2 переменных u_{ij} ($i, j = 1, \dots, N$) во внутренних точках сетки являются неизвестными в уравнениях (4.5.2). Таким образом, получается линейная система из $n = N^2$ уравнений, решение которой дает приближения к решению (4.5.1) в узлах сетки.

Полученную систему можно записать в виде $Ax = b$, взяв $x_k = u_{1k}$ ($k = 1, \dots, N$) в качестве неизвестных первой линии узлов сетки, $x_k = u_{2,k-N}$ ($k = N+1, \dots, 2N$) – второй линии узлов, и т.д. Таким образом,

$$x^T = (u_{11}, \dots, u_{1N}, u_{21}, \dots, u_{2N}, \dots, u_{N1}, \dots, u_{NN}). \quad (4.5.3)$$

Соответствующую матрицу коэффициентов можно записать в блочном виде

$$A = \begin{bmatrix} T & -I & \dots & O \\ -I & T & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ O & \dots & -I & T \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} 4 & -1 & \dots & O \\ -1 & 4 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ O & \dots & -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad (4.5.4)$$

где I – единичная матрица $N \times N$ и T также имеет размеры $N \times N$. Правая часть b полученной системы образована величинами $(-h^2 f_{ij})$, скорректированными в приграничных точках сетки при помощи известных значений u_{ij} на границе.

Решение уравнение Пуассона на прямоугольной сетке позволяет показать основные особенности применения итерационных методов на параллельных архитектурах. Тем не менее, более сложные задачи имеют важные особенности. Некоторые подробности решения задач на нерегулярных областях, особенности дискретизации на неравномерных и неструктурированных сетках приводятся в работах (McBryan and van de Velde, 1985, Morison and Otto, 1987).

Метод Якоби. Пусть A – невырожденная матрица размера $n \times n$. Необходимо найти решение системы линейных уравнений:

$$Ax = b \quad (4.5.5)$$

где диагональные элементы a_{ii} матрицы A являются ненулевыми. Тогда метод Якоби имеет вид:

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(-\sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^k + b_i \right), \quad (i = 1, \dots, n), \quad (4.5.6)$$

$$k = 0, 1, \dots, \quad (4.5.7)$$

где верхние индексы означают номер итерации, причем предполагается, как и для всех итерационных методов, что $x_1^0, \dots, x_n^0$ представляют собой заданную аппроксимацию решения системы (4.5.5). Для многих целей удобно переписать (4.5.6) в матричной форме. Пусть $D = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn})$ – диагональная матрица, образованная диагональными элементами A , и пусть $B = D - A$, т.е. $A = D - B$ представляет собой разложение матрицы на диагональную и внедиагональную части. Тогда (4.5.6) можно записать следующим образом:

$$x^{k+1} = Hx^k + d, \quad k = 0, 1, \dots, \quad H = D^{-1}B, \quad d = D^{-1}b. \quad (4.5.8)$$

Итерации Якоби описаны во многих книгах (см., например, Фаддеев и Фаддеева, 1963).

Эффективная параллельная или векторная реализация матрично-векторного умножения существенно зависит от структуры матрицы H . Итерационные методы, вообще говоря, используются только в том случае, когда матрица A , а значит, и H ,

является большой разреженной матрицей типа тех, которые возникают при дискретизации эллиптических краевых задач с помощью конечных разностей или конечных элементов. Метод Якоби для уравнений (4.5.2) приводит к соотношениям:

$$u_{ij}^{k+1} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k - h^2 f_{ij}), \quad (4.5.9)$$

$$i, j = 1, \dots, N; \quad k = 0, 1, \dots$$

На параллельных системах с локальной памятью по завершении каждой итерации новые значения, полученные в граничных точках сетки, необходимо передать соседним процессорам. Для метода Якоби привлекательной альтернативой служит возможность асинхронной работы процессоров (без какой бы то ни было синхронизации). В этом случае некоторые итерационные приближения могут быть вычислены некорректно. Однако, это не обязательно нанесет ущерб итерационному процессу в целом, так что в некоторых случаях с точки зрения общих затрат может оказаться выгодным применять итерационные методы в асинхронном варианте. Детальное изучение асинхронных итераций, включающее численные эксперименты, можно найти в (Barlow and Evans, 1982).

Метод Гаусса-Зейделя и SOR. Основная идея метода Гаусса – Зейделя состоит в том, что полученная информация должна использоваться сразу же, как только она становится доступна. Итерации принимают следующий вид:

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(-\sum_{j<i} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^k + b_i \right), \quad (i = 1, \dots, n), \quad (4.5.10)$$

$$k = 0, 1, \dots$$

Пусть

$$A = D - L - U, \quad (4.5.11)$$

где D – диагональная часть матрицы A , а $-L$ и $-U$ – соответственно, строго нижняя и строго верхняя треугольные части матрицы A . Тогда нетрудно убедиться, что соотношения (4.5.10) можно представить в виде

$$Dx^{k+1} = Lx^{k+1} + Ux^k + b, \quad (4.5.12)$$

или

$$x^{k+1} = Hx^k + d, \quad k = 0, 1, \dots, \quad H = (D - L)^{-1}U, \quad d = (D - L)^{-1}b. \quad (4.5.13)$$

Так как матрица $D - L$ есть нижняя треугольная часть матрицы A , то обратная к ней матрица существует в силу предположения о том, что диагональные элементы матрицы A отличны от нуля. Сходимость метода Гаусса-Зейделя для любого начального приближения x^0 обеспечивается в случае, если матрица A либо имеет строгое диагональное преобладание, либо является неприводимой с диагональным преобладанием, либо является M -матрицей (Ortega, 1988).

Существует важная модификация метода Гаусса – Зейделя. Если обозначить через $\hat{x}_i^{k+1}$ правую часть (4.5.10), задающую итерационное приближение метода Гаусса-Зейделя, и определить

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega(\hat{x}_i^{k+1} - x_i^k), \quad (4.5.14)$$

то подставляя выражение для $\hat{x}_i^{k+1}$ в (4.5.14) и переупорядочивая слагаемые, можно показать, что величины x_i^{k+1} удовлетворяют уравнениям

$$a_{ii}x_i^{k+1} + \omega \sum_{j < i} a_{ij}x_j^{k+1} = (1 - \omega)a_{ii}x_i^k - \omega \sum_{j > i} a_{ij}x_j^k + \omega b_i. \quad (4.5.15)$$

С использованием матриц, фигурирующих в (4.5.11), это соотношение переписывается в следующем виде:

$$x^{k+1} = (D - \omega L)^{-1} [(1 - \omega)D + \omega U]x^k + \omega(D - \omega L)^{-1}b, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (4.5.16)$$

Полученная формула определяет итерационный метод последовательной верхней релаксации SOR (successive overrelaxation). Матрица $D - \omega L$ является невырожденной в силу принятого предположения о диагональных элементах матрицы A . Для $\omega = 1$ процесс (4.5.16) сводится к итерациям Гаусса-Зейделя. Для того, чтобы итерации метода SOR сходились при любом начальном приближении x^0 , необходимо (Фаддеев и Фаддеева, 1963, Young, 1971), чтобы параметр ω принадлежал интервалу $(0, 2)$.

Одним из перспективных подходов к параллельной реализации метода SOR является такое переупорядочение уравнений линейной системы, чтобы решение соответствующей ниже-треугольной системы можно было эффективно распараллелить. В отличие от итераций Якоби, итерации Гаусса-Зейделя существенно зависят от порядка уравнений. Важным типом переупорядочения, рассмотренным для параллельного вычисления еще в 70-х годах прошлого столетия (см., например, Lambiotte, 1975) и ставшим классическим, является красно-черное (или шахматное) переупорядочение. Точки сетки сначала разделяются на два подмножества, «красное» и «черное», а затем упорядочиваются внутри каждого из этих подмножеств.

Для любого значения N в любой внутренней точке сетки красные точки окажутся связанными только с черными и наоборот. Таким образом, при условии, что все красные точки упорядочены первыми, в матричной форме система будет иметь вид

$$\begin{bmatrix} D_R & C \\ C^T & D_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_R \\ u_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}. \quad (4.5.17)$$

Здесь $D_R = 4I_R$ и $D_B = 4I_B$, где I_R – единичная матрица порядка, равного числу внутренних красных точек, и аналогичным образом определяется I_B . Матрица C описывает связи между красными и черными неизвестными. Матрица коэффициентов в (4.5.17) должна быть симметричной, поскольку она является матрицей вида PAP^T , где A – симметричная матрица. Если теперь рассмотреть итерации Гаусса-Зейделя для системы (4.5.17):

$$\begin{bmatrix} D_R & 0 \\ C^T & D_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_R^{k+1} \\ u_B^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & C \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_R^k \\ u_B^k \end{bmatrix}, \quad (4.5.18)$$

то эти соотношения можно разделить на две части:

$$u_R^{k+1} = D_R^{-1}(b_1 - Cu_B^k), \quad u_B^{k+1} = D_B^{-1}(b_2 - C^T u_R^{k+1}). \quad (4.5.19)$$

Таким образом, хотя (4.5.18) формально требует решения системы с ниже-треугольной матрицей для того, чтобы продвинуться еще на один итерационный шаг, однако, то

обстоятельство, что матрицы D_R и D_B являются диагональными, позволяет свести решение этой системы к матрично-векторным умножениям (4.5.19).

Для итераций метода SOR параметр ω вводится обычным образом. Если применить (4.5.16) к (4.5.18), то получится:

$$\begin{bmatrix} D_R & 0 \\ \omega C^T & D_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_R^{k+1} \\ u_B^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega b_1 \\ \omega b_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (1-\omega)D_R & -\omega C \\ 0 & (1-\omega)D_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_R^k \\ u_B^k \end{bmatrix},$$

или

$$u_R^{k+1} = D_R^{-1}[\omega b_1 + (1-\omega)D_R u_R^k - \omega C u_B^k], \quad (4.5.20a)$$

$$u_B^{k+1} = D_B^{-1}[\omega b_2 + (1-\omega)D_B u_B^k - \omega C^T u_R^{k+1}]. \quad (4.5.20b)$$

Новые итерационные приближения метода Гаусса-Зейделя для красных точек совпадают с приближениями метода Якоби для этих же точек; аналогичное утверждение справедливо и для черных точек. Таким образом, итерация метода SOR реализуется при помощи двух итераций метода Якоби, каждая из которых затрагивает свою часть (примерно половину) узлов сетки. Синхронизация должна выполняться после каждого шага Якоби. Перед тем, как начать вычисления с красными точками, необходимо вычислить все черные значения и передать их тем процессорам, которым они потребуются, и наоборот. Альтернативой является, как и в случае итераций Якоби, асинхронное выполнение итераций.

Выполнение итераций метода SOR с красно-черным упорядочением точек сетки ограничено преимущественно простыми уравнениями в частных производных, такими как уравнение Пуассона, дискретизированным простейшим образом. В более сложном случае решение проблемы достигается за счет введения большего числа цветов. При этом критерием удачной раскраски служит требование, чтобы любая точка сетки, взятая в качестве центральной точки шаблона, имела цвет, отличный от цвета всех остальных точек шаблона. Это и есть то «локальное разделение» неизвестных, которое позволяет получить матричную запись задачи, имеющую в общем случае вид

$$\begin{bmatrix} D_1 & B_{12} & \cdots & B_{1,c} \\ B_{21} & D_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ B_{c,1} & \cdots & & B_{c,c-1} & D_c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_c \end{bmatrix}, \quad (4.5.21)$$

где диагональные блоки D_i представляют собой диагональные матрицы. Матрицы вида (4.5.21) называются c -цветными матрицами. Для системы, представленной в виде (4.5.21), итерацию метода Гаусса-Зейделя можно выполнить по формулам

$$u_i^{k+1} = D_i^{-1} \left(b_i - \sum_{j<i} B_{ij} u_j^{k+1} - \sum_{j>i} B_{ij} u_j^k \right), \quad i = 1, \dots, c, \quad (4.5.22)$$

и опять решение треугольной системы сводится к выполнению операций, аналогичных использовавшимся для реализации метода Якоби.

Вообще говоря, желательно использовать минимальное число цветов, позволяющее добиться приведения матрицы к виду (4.5.21). Для произвольных шаблонов, которые изменяются от одной точки сетки к другой, и для произвольных сеток это является трудной задачей. Однако, если для каждой точки сетки шаблон остается одним и тем же,

способ минимизации числа цветов обычно оказывается очевидным. Но такой способ раскраски не обязательно будет единственным, даже если используется минимальное число цветов. Применение многоцветных упорядочений подробно рассматривается в работе (Adams and Ortega, 1982). Скорость сходимости методов SOR и Гаусса-Зейделя зависит от способа упорядочения уравнений. Влияние четырехцветных упорядочений девятиточной дискретизации уравнения Пуассона на скорость сходимости, рассмотрено в работе (Adams et al., 1988).

Метод SSOR. Другой важной модификацией итераций SOR является метод симметричной последовательной верхней релаксации SSOR (symmetric successive overrelaxation). Каждый шаг метода SSOR осуществляется в два этапа: после итерации метода SOR выполняется итерация SOR с обратным упорядочением. Целесообразно рассмотреть такую схему сначала для метода Гаусса-Зейделя (при этом получается симметричный метод Гаусса-Зейделя SGS, symmetric Gauss-Seidel). На k -й итерации приближение Гаусса-Зейделя, которое помечено полуцелым индексом $k + \frac{1}{2}$, получается по формуле

$$x^{k+\frac{1}{2}} = (D-L)^{-1} Ux^k + (D-L)^{-1} b. \quad (4.5.23)$$

Далее следует пройти по всем уравнениям в обратном порядке, используя значения $x^{k+\frac{1}{2}}$:

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(-\sum_{j>i} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{k+\frac{1}{2}} + b_i \right), \quad i = n, n-1, \dots, 1.$$

С помощью матриц D , L и U эти соотношения можно представить в виде

$$Dx^{k+1} = Ux^{k+1} + Lx^{k+\frac{1}{2}} + b,$$

или

$$x^{k+1} = (D-U)^{-1} Lx^{k+\frac{1}{2}} + (D-U)^{-1} b. \quad (4.5.24)$$

Видно, что на этом этапе матрицы L и U меняются ролями. Одна итерация метода SGS получается, таким образом, в результате комбинирования (4.5.23) и (4.5.24):

$$x^{k+1} = (D-U)^{-1} L(D-L)^{-1} Ux^k + \hat{d}, \quad (4.5.25)$$

где

$$\hat{d} = (D-U)^{-1} L(D-L)^{-1} b + (D-U)^{-1} b.$$

Для того чтобы получить метод SSOR, достаточно просто вставить параметр ω в формулы, описывающие оба полушага, подобно тому, как это сделано в (4.5.14) – (4.5.16). Матричная запись итерации метода SSOR принимает следующий вид:

$$x^{k+1} = (D-\omega U)^{-1} [(1-\omega)D + \omega L] (D-\omega L)^{-1} [(1-\omega)D + \omega U] x^k + \hat{d}, \quad (4.5.26)$$

где теперь

$$\hat{d} = \omega(D - \omega U)^{-1} [(1 - \omega)D + \omega L](D - \omega L)^{-1} + I)b.$$

С позиции дискретизации уравнений в частных производных каждая итерация симметричного метода Гаусса-Зейделя или метода SSOR сводится к проходу по точкам сетки на первом полушаге с последующим проходом в обратном порядке на втором полушаге. Для метода SSOR выполняется аналогичное утверждение по поводу выбора параметра ω , что и для рассмотренного выше метода SOR.

Метод SSOR можно реализовать точно так же, как и метод SOR, с использованием красно-черного или многоцветного упорядочений. Однако рассматриваемый случай имеет одну особенность, позволяющую сократить вычислительные затраты. В том случае, если $\omega = 1$, то метод SSOR неявно повторяет вычисления на прямом шаге и следующим за ним обратном проходе одного цвета (аналогично для обратного и прямого прохода), что позволяет его исключить. Аналогичный подход можно использовать при $\omega \neq 1$ для совмещения двух проходов в один. Следует отметить, что в случае, когда исходная система уравнений может быть записана в красно-черной форме, известно, что оптимальным значением параметра ω с точки зрения скорости сходимости метода SSOR является $\omega = 1$.

Имеется другой способ сокращения вычислительных затрат метода SSOR, предложенный в работе (Conrad and Wallach, 1977). Итерацию SSOR (4.5.26) можно представить в виде

$$(D - \omega L)x^{k+\frac{1}{2}} = (1 - \omega)Dx^k + \omega y^k + \omega b, \quad y^{k+\frac{1}{2}} = Lx^{k+\frac{1}{2}} + b, \quad (4.5.27a)$$

$$(D - \omega U)x^{k+1} = (1 - \omega)Dx^{k+\frac{1}{2}} + \omega y^{k+\frac{1}{2}}, \quad y^{k+1} = Ux^{k+1}, \quad (4.5.27b)$$

где $y^0 = Ux^0$. Смысл формул (4.5.27) заключается в таком выполнении итерации метода SSOR, чтобы величины $y^{k+\frac{1}{2}}$ и y^{k+1} получались бы без каких-либо дополнительных затрат.

Пусть к началу $(k+1)$ -й итерации $y^k = Ux^k$. Тогда в покомпонентной форме вычисление величин $x_i^{k+\frac{1}{2}}$ задается формулами

$$\hat{x}_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{j<i} l_{ij} x_j^{k+\frac{1}{2}} + y_i^k + b_i \right), \quad x_i^{k+\frac{1}{2}} = x_i^k + \omega(\hat{x}_i^{k+\frac{1}{2}} - x_i^k), \quad (4.5.28)$$

В процессе этих вычислений значения y_i^k заменяются на

$$y_i^{k+\frac{1}{2}} = \sum_{j<i} l_{ij} x_j^{k+\frac{1}{2}} + b_i.$$

Таким образом, закончив вычисление $x^{k+\frac{1}{2}}$, можно получить также $y^{k+\frac{1}{2}} = Lx^{k+\frac{1}{2}} + b$. На следующем полушаге вычисляется

$$\hat{x}_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{j>i} u_{ij} x_j^{k+1} + y_i^{k+\frac{1}{2}} \right), \quad x_i^{k+1} = x_i^{k+\frac{1}{2}} + \omega(\hat{x}_i^{k+1} - x_i^{k+\frac{1}{2}}), \quad (4.5.29)$$

В процессе выполнения этого полушага $y_i^{k+\frac{1}{2}}$ заменяется на

$$y_i^{k+1} = \sum_{j>i} u_{ij} x_j^{k+1}, \quad (4.5.30)$$

так что по завершении вычисления x^{k+1} будет получен также вектор $y^{k+1} = Ux^{k+1}$, необходимый для того, чтобы начать выполнение следующей итерации. Таким образом, устраняется явное вычисление $Lx^{k+\frac{1}{2}}$ и Ux^{k+1} , за исключением самого начала итераций, когда нужно вычислить $y^0 = Ux^0$.

Блочные методы. Пусть заданная матрица A разбита на подматрицы так, что

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{q1} & \cdots & A_{qq} \end{bmatrix}, \quad (4.5.31)$$

причем предполагается, что каждая матрица A_{ii} является невырожденной. Тогда блочный метод Якоби решения системы $Ax = b$, отвечающий введенному разбиению, имеет вид

$$A_{ii}x_i^{k+1} = -\sum_{j \neq i} A_{ij}x_j^k + b_i, \quad i = 1, \dots, q, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (4.5.32)$$

где разбиение векторов x и b согласовано с разбиением A . Таким образом, выполнение одной блочной итерации Якоби требует решения q систем вида (4.5.32) с матрицами коэффициентов A_{ii} . В некоторых случаях для компьютеров с последовательной обработкой блочные методы оказываются более быстрыми, чем точечные.

В качестве примера блочного метода Якоби можно снова рассмотреть дискретное уравнение Пуассона (4.5.2) и соответствующее матричное представление (4.5.4). В этом случае $q = N$, $A_{ii} = T$, $i = 1, \dots, N$, $A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = -I$, а все остальные блоки A_{ij} – нулевые. Соотношения (4.5.32) принимают вид

$$Tx_i^{k+1} = x_{i+1}^k + x_{i-1}^k + b_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (4.5.33)$$

где векторы x_0^k и x_{N+1}^k содержат граничные значения вдоль нижней и верхней границы соответственно, а векторы b_i содержат граничные значения на боковых сторонах области и значения $h^2 f$. Результатом применения (4.5.33) является одновременное обновление всех неизвестных каждой строки сеточных узлов с использованием приближений к неизвестным на смежных линиях сетки, полученных на предыдущей итерации. Поэтому метод (4.5.33) известен под названием полинейного метода Якоби (Varga, 1962).

Для реализации (4.5.33) необходимо выполнить разложение Холецкого или LU -разложение матрицы T , а затем использовать полученные множители при решении систем (4.5.33). Таким образом, если $T = LU$, то вычисления (4.5.33) выполняются следующим образом:

$$\begin{aligned} d_i^k &= x_{i+1}^k + x_{i-1}^k + b_i, \quad i = 1, \dots, N, \\ \text{решить } Ly_i^k &= d_i^k, \quad i = 1, \dots, N, \\ \text{решить } Ux_i^{k+1} &= y_i^k, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Системы для y_i^k независимы и поэтому могут решаться параллельно; то же справедливо и для систем для x_i^{k+1} , если векторы y_i^k уже известны. В общем случае, если предположить,

что любое неизвестное, расположенное на i -й полосе, связано только с неизвестными на полосах с номерами $i-1$ и $i+1$, то A будет иметь блочно-трехдиагональную форму.

Как и метод Якоби, метод Гаусса-Зейделя можно применить к матрице с блочным разбиением (4.5.31), в результате чего получается блочный метод Гаусса-Зейделя

$$A_{ii}x_i^{k+1} = -\sum_{j<i} A_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j>i} A_{ij}x_j^k + b_i, \quad (4.5.34)$$

$$i = 1, \dots, q, \quad k = 0, 1, \dots$$

Параметр ω вводится по аналогии с (4.5.14):

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega(\hat{x}_i^{k+1} - x_i^k), \quad (4.5.35)$$

где $\hat{x}_i^{k+1}$ теперь обозначает итерационное приближение Гаусса-Зейделя, вычисленное по формуле (4.5.34), и тем самым определяются итерации блочного метода SOR. Для уравнения Пуассона и матрицы (4.5.4) блочный метод (4.5.34) сводится к

$$Tx_i^{k+1} = x_{i-1}^{k+1} + x_{i+1}^k + b_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.5.36)$$

Как и для соответствующего полинейного метода Якоби, новые итерационные приближения на линии узлов сетки обновляются одновременно. Отличие же состоит в том, что полученные итерационные приближения используются сразу же, как только делается переход к обработке следующей линии узлов. Поэтому (4.5.36) называют полинейным методом Гаусса-Зейделя, а соответствующие итерации метода SOR обычно называют методом последовательной полинейной верхней релаксации SLOR или LSOR (successive line overrelaxation).

Эффективное распараллеливание (4.5.36) встречает те же трудности, что и для поточечного метода Гаусса-Зейделя, а одним из путей их преодоления является переупорядочение уравнений, а именно, раскрашивание точек сетки по линиям. В этом случае уравнения для неизвестных на i -й линии связывают красные точки только с черными точками, расположенными на смежных линиях. Если обозначить через $u_{R,i}$ вектор, образованный неизвестными на i -й красной линии, и ввести аналогичное обозначение для неизвестных на черных линиях, то шаг полинейного метода Гаусса-Зейделя, соответствующий пересчету значений в красных точках, имеет вид

$$Tu_{R,i}^{k+1} = u_{B,i-1}^k + u_{B,i}^k + b_i, \quad i = 1, \dots, \frac{N}{2} \quad (4.5.37)$$

и аналогично для пересчета в черных точках. Трехдиагональные системы (4.5.37) можно теперь решать параллельно, как это делалось для полинейного метода Якоби. Единственное различие заключается в том, что теперь длина векторов составляет $O(N/2)$.

Для более общих уравнений и/или дискретизаций применяется тот же принцип, хотя могут потребоваться дополнительные цвета. Системы уравнений, для которых используется раскрашивание по линиям, по-прежнему допускают представление в виде (4.5.21), однако теперь диагональные блоки D_i будут иметь форму

$$D_i = \begin{bmatrix} D_{i,1} & \cdots & \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ & \cdots & D_{i,c_i} \end{bmatrix}, \quad (4.5.38)$$

где c_i – количество линий i -го цвета и каждая матрица $D_{i,j}$ имеет ленточную структуру.

Методы переменных направлений. Центральным из этих методов является метод Писмана-Рэкфорда, который ниже описан сначала для случая дискретного уравнения Пуассона (4.5.2) на квадрате. Итерация этого метода с номером $k+1$ состоит из двух шагов. На первом шаге для некоторого параметра α_k решается N линейных систем для $j=1, \dots, N$:

$$(2 + \alpha_k)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} - u_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} - u_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} = (-2 + \alpha_k)u_{i,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k + h^2 f_{i,j}, \quad i=1, \dots, N. \quad (4.5.39a)$$

На втором шаге решается N линейных систем для $i=1, \dots, N$:

$$(2 + \alpha_k)u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1} - u_{i,j+1}^{k+1} = (-2 + \alpha_k)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} + h^2 f_{i,j}, \quad j=1, \dots, N. \quad (4.5.39б)$$

На первом шаге (4.5.39a) получаются промежуточные значения $u^{k+\frac{1}{2}}$, которые затем используются на втором шаге (4.5.39б) для вычисления окончательных значений итерационных приближений, соответствующих $(k+1)$ -й итерации.

Как и для полинейного метода Якоби, (4.5.39a) сводится к отысканию новых значений u на каждой линии, в то время как значения u на смежных линиях сохраняются прежними. В (4.5.39б) направления линий изменяются на вертикальные, т.е. осуществляется вычисление новых значений u вдоль каждой вертикальной линии точек сетки с использованием значений на смежных линиях, только что полученных при выполнении первого шага. Отсюда и происходит название «метод переменных направлений».

Алгоритм (4.5.39) можно переформулировать в матричных обозначениях. Пусть при $n = N^2$ объекты H и V представляют собой матрицы размером $n \times n$

$$H = \begin{bmatrix} C & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & C \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} 2I & -I & \dots & 0 \\ -I & 2I & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & & 2I & -I \\ & & & -I & 2I \end{bmatrix}, \quad (4.5.40)$$

где все единичные матрицы имеют размеры $N \times N$, а C является матрицей $N \times N$ вида

$$C = \begin{bmatrix} 2 & -1 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (4.5.41)$$

Тогда

$$A = H + V, \quad (4.5.42)$$

где A – матрица (4.5.4) коэффициентов системы, отвечающей дискретному уравнению Пуассона. Формулы (4.5.39) эквивалентны соотношениям

$$(\alpha_k I + H)x^{k+1/2} = (\alpha_k I - V)x^k + b, \quad (4.5.43a)$$

$$(\alpha_k I + V)x^{k+1} = (\alpha_k I - H)x^{k+1/2} + b, \quad (4.5.43б)$$

где x – вектор неизвестных на внутренних точках сетки, определенный в (4.5.3), а вектор b содержит граничные значения и значения f .

Если H и V заданы формулами (4.5.40), то из (4.5.43a) следует, что вектор $x^{k+1/2}$ вычисляется путем решения N трехдиагональных систем с матрицами коэффициентов вида $\alpha_k I + C$. Системы в (4.5.43б) уже не являются трехдиагональными, однако, в этом случае существует такая матрица перестановки P , что $PVP^T = H$. Таким образом, системы (4.5.43б) перестановочно подобны трехдиагональным системам и могут решаться аналогично. Поскольку матрица C в (4.5.41) положительно определена, то тем же свойством обладает и матрица H . Это означает, что матрица V также положительно определена, поскольку является симметричной перестановкой матрицы H . Следовательно, для $\alpha_k \geq 0$ матрицы коэффициенты систем в (4.5.43) положительно определены и потому являются невырожденными. Указанное свойство положительной определенности является ключевым для сходимости итераций. Справедлива следующая теорема.

Пусть A , H и V – симметричные, положительно определенные матрицы $n \times n$, удовлетворяющие соотношению (4.5.42), и пусть $\alpha_k = \alpha > 0$, $k = 0, 1, \dots$. Тогда итерации (4.5.43) корректно определены и сходятся к единственному решению системы $Ax = b$ при любом начальном приближении x^0 (Vagra, 1962). Эта теорема верна для любой положительно определенной матрицы A , однако, матрицы H и V должны быть подобраны так, чтобы системы в (4.5.43) «легко» решались. Условие $\alpha > 0$ является существенным: сходимость итераций отсутствует, если все α_k в (4.5.43) равны нулю. Данная теорема распространяется на случай, когда α_k образуют последовательность различных положительных чисел. При специальном выборе значений α_k можно добиться очень быстрой сходимости итераций. Однако, в этом случае нужно наложить довольно сильное ограничение $HV = VH$. Это условие коммутативности выполняется для матриц H и V в (4.5.40), но в общем случае оно будет справедливо только для некоторых эллиптических краевых задач при подходящих способах дискретизации.

Параллельную и векторную реализации (4.5.39) можно осуществить следующим образом. Поскольку N трехдиагональных систем в (4.5.39a) независимы, то их можно решать параллельно или при помощи сквозной векторизации по аналогии с полинейным методом Якоби. То же самое можно было бы сделать и с системами (4.5.39б). Однако, если способ хранения итерационного приближения был корректным при решении систем (4.5.39a), то он уже не является таковым для решения систем (4.5.39б). По существу, теперь требуется предварительное переупорядочение данных типа транспонирования матрицы. Вместе с тем, принятый способ хранения данных остается корректным для решения трехдиагональных систем (4.5.39б) методом циклической редукции.

Методы минимизации. Если вещественная матрица $n \times n$ является симметричной и положительно определенной, то решение линейной системы $Ax = b$ эквивалентно минимизации квадратичной функции

$$Q(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x. \quad (4.5.44)$$

Известно большое количество итерационных методов минимизации функций Q типа (4.5.44). Большинство таких методов имеют общий вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k p^k, \quad (4.5.45)$$

где p^k – векторы направлений, а скаляры α_k определяют расстояние, на которое осуществляется продвижение по направлению p^k . В зависимости от выбора α_k и p^k можно получить множество различных методов. Хороший обзор отечественных работ по этой тематике можно найти в книге (Федоренко, 1973).

Возможно, наиболее естественным способом выбора α_k представляется тот, при котором достигается минимум Q в направлении p^k , т. е.

$$Q(x^k - \alpha_k p^k) = \min_{\alpha} Q(x^k - \alpha p^k). \quad (4.5.46)$$

Для заданных векторов x^k и p^k (4.5.46) представляет собой одномерную задачу минимизации по переменной α , которую можно решить в явном виде. Для простоты обозначений можно опустить индексы для x^k и p^k . Тогда

$$\begin{aligned} q(\alpha) &\equiv Q(x - \alpha p) = \frac{1}{2}(x - \alpha p)^T A(x - \alpha p) - b^T(x - \alpha p) = \\ &= \frac{1}{2} p^T A p \alpha^2 - p^T (Ax - b) \alpha + \frac{1}{2} x^T (Ax - 2b). \end{aligned} \quad (4.5.47)$$

Поскольку предполагается, что матрица A положительно определена, то $p^T A p > 0$ и квадратный трехчлен q относительно α достигает минимума при $q'(\alpha) = 0$, т. е. при

$$\alpha_k = (p^k)^T (Ax^k - b) / (p^k)^T A p^k. \quad (4.5.48)$$

Для функции g от n переменных вектор градиента ∇g в точке x , взятый с отрицательным знаком, определяет направление наиболее сильного локального убывания функции g в точке x . Поэтому естественным выбором вектора направления p^k в алгоритме минимизации является

$$p^k = -\nabla Q(x^k) = Ax^k - b, \quad (4.5.49)$$

что определяет метод наискорейшего спуска

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k (Ax^k - b), \quad (4.5.50)$$

известный также как метод Ричардсона. Если матрица A масштабирована так, что ее диагональные элементы равны единице и $\alpha_k = 1$, то (4.5.50) сводится к итерационному методу Якоби. Несмотря на то, что перемещение в направлении градиента, взятого с противоположным знаком, приводит к наибольшему локальному убыванию значения функции Q , метод наискорейшего спуска обычно сходится очень медленно.

Весьма интересный класс методов, получивших название методов сопряженных направлений, возникает, когда в распоряжении имеются n векторов направлений $p^0, \dots, p^{n-1}$, удовлетворяющих условию

$$(p^i)^T A p^j = 0, \quad i \neq j. \quad (4.5.51)$$

Эти векторы ортогональны в терминах скалярного произведения $(x, y) = x^T A y$, определенного при помощи матрицы A ; их называют также сопряженными относительно A . Одно из основных свойств методов сопряженных направлений формулируется в виде следующего результата.

Если A – вещественная, симметричная, положительно определенная матрица размера $n \times n$, а $p^0, \dots, p^{n-1}$ – ненулевые векторы, удовлетворяющие условию (4.5.51), то при любом начальном приближении x^0 итерационные приближения $x^{k+1} = x^k - \alpha_k p^k$, где α_k выбраны в соответствии с принципом минимизации (4.5.48), сходятся к точному решению системы $Ax = b$ не более чем за n шагов (Фаддеев и Фаддеева, 1963). Эта теорема гарантирует не только сходимость итераций, но и то, что в отсутствие ошибок округления для сходимости требуется конечное число итераций, не превосходящее n . Таким образом, методы сопряженных направлений в сущности являются прямыми методами, однако наиболее полезной оказывается их трактовка как итерационных методов.

Метод сопряженных градиентов. Наиболее эффективным способом построения последовательности векторов сопряженных направлений для системы $Ax = b$ является метод сопряженных градиентов (Hestenes and Stiefel, 1952), в котором вектора направлений генерируются в процессе выполнения самого метода. Ниже приводится основной алгоритм, в котором используется скалярное произведение $(x, y) = x^T y$, а через $r^k \equiv b - Ax^k$ обозначается невязка на k -м шаге. Алгоритм заключается в следующем: выбрать x^0 , положить $p^0 = r^0$, вычислить (r^0, r^0) , а затем

для $k = 0, 1, \dots$

$$\alpha_k = -(r^k, r^k) / (p^k, A p^k), \quad (4.5.52a)$$

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k p^k, \quad (4.5.52б)$$

$$r^{k+1} = r^k + \alpha_k A p^k, \quad (4.5.52в)$$

$$\text{если } \|r^{k+1}\|_2 \geq \varepsilon, \text{ продолжать} \quad (4.5.52г)$$

$$\beta_k = (r^{k+1}, r^{k+1}) / (r^k, r^k), \quad (4.5.52д)$$

$$p^{k+1} = r^{k+1} + \beta_k p^k. \quad (4.5.52е)$$

Здесь формула (4.5.48) вычисления α_k заменена на другую формулу, эквивалентную (4.5.48) в контексте метода сопряженных градиентов. Формула (4.5.52в) описывает следующую невязку, так как

$$r^{k+1} = b - Ax^{k+1} = b - A(x^k - \alpha_k p^k).$$

Поскольку вектор $A p^k$ уже известен, это позволяет сэкономить вычисление $A x^k$. На двух заключительных шагах происходит вычисление следующего сопряженного направления. На параллельных вычислительных системах распределение компонент вектора x^k по процессорам определяет также и распределение компонент векторов p^k и r^k .

Для любой большой задачи в вычислительных затратах метода сопряженных градиентов будет доминировать вычисление произведений $A p^k$, так что эффективная реализация этой операции является ключевым моментом. Однако, даже если эту процедуру удастся сделать эффективной, необходимость вычисления скалярных

произведений приводит к некоторому понижению общей эффективности. Потери эффективности при параллельной реализации метода сопряженных градиентов можно сократить, если использовать видоизмененные алгоритмы метода сопряженных градиентов, где, в отличие от (4.5.52), два или три скалярных произведения могут вычисляться одновременно (см., например, Meurant, 1984). Методы сопряженных градиентов не требуют явного задания матрицы A : достаточно лишь обеспечить возможность вычисления произведения Ap .

Так как в точной арифметике метод сопряженных градиентов сходится к точному решению за n шагов, то он может рассматриваться как прямой метод, представляющий собой альтернативу, например, факторизации Холецкого. Однако ошибки округления нарушают указанное свойство конечной сходимости. В работе (Reid, 1971) показано, что для больших разреженных задач, возникающих, например, при дискретизации уравнений в частных производных, метод сопряженных градиентов имеет достаточно хорошую сходимость, причем число итераций оказывается гораздо меньше n . Можно построить блочные алгоритмы сопряженных градиентов, которые позволяют сократить время, затрачиваемое на межпроцессорные обмены (O'Leary, 1987).

Предобусловленный метод сопряженных градиентов. Оценить скорость сходимости метода сопряженных градиентов позволяет неравенство (Ortega, 1987)

$$\|x^k - \hat{x}\|_2 < \|2\sqrt{\chi}\alpha^k x^0 - \hat{x}\|_2, \quad (4.5.53)$$

где $\hat{x}$ — точное решение системы, а

$$\alpha = (\sqrt{\chi} - 1) / (\sqrt{\chi} + 1) \quad (4.5.54)$$

и

$$\chi = \text{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \lambda_n / \lambda_1. \quad (4.5.55)$$

В (4.5.55) величина χ есть не что иное, как число обусловленности матрицы A в норме l_2 , причем предполагается, что A — симметричная, положительно определенная матрица с собственными значениями $\lambda_n \geq \dots \geq \lambda_1 > 0$. Следует заметить, что $\alpha = 0$ при $\chi = 1$ и $\alpha \rightarrow 1$ при $\chi \rightarrow \infty$. Поэтому, чем больше будет значение χ , тем ближе будет величина α к единице и тем сильнее замедлится скорость сходимости.

Это обстоятельство вызывает необходимость предобусловливания матрицы A посредством преобразования конгруэнтности (Concus et al., 1976):

$$\hat{A} = SAS^T, \quad (4.5.56)$$

где S — невырожденная матрица, выбранная таким образом, что $\text{cond}(\hat{A}) < \text{cond}(A)$.

Тогда система, которую нужно будет решать, запишется в виде

$$\hat{A}\hat{x} = \hat{b}, \quad (4.5.57)$$

где $\hat{x} = S^{-T}x$ и $\hat{b} = Sb$. Алгоритм предобусловленного метода сопряженных градиентов PCG (preconditioned conjugate gradient method) состоит в следующем: выбрать x^0 , вычислить $r^0 = b - Ax^0$, решить систему $M\hat{r}^0 = r^0$, положить $p^0 = \hat{r}^0$, а затем

для $k = 0, 1, \dots$

$$\alpha_k = -(r^k, r^k) / (p^k, Ap^k), \quad (4.5.58a)$$

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k p^k, \quad (4.5.58б)$$

$$r^{k+1} = r^k + \alpha_k Ap^k, \quad (4.5.58в)$$

$$\text{проверить сходимость итераций}, \quad (4.5.58г)$$

$$\text{решить систему } M\hat{r}^{k+1} = r^{k+1}, \quad (4.5.58д)$$

$$\beta_k = (\hat{r}^{k+1}, r^{k+1}) / (\hat{r}^k, r^k), \quad (4.5.58е)$$

$$p^{k+1} = \hat{r}^{k+1} + \beta_k p^k. \quad (4.5.58ж)$$

Матрица S фигурирует лишь неявным образом через матрицу M , представляющую аппроксимацию матрицы A :

$$(S^T S^{-1})^{-1} = M. \quad (4.5.59)$$

Поскольку вспомогательную систему $M\hat{r} = r$ приходится решать на каждой итерации метода, то существенным является требование простоты решения этой системы. С другой стороны, для того, чтобы предобусловливание было эффективным, желательно, чтобы матрица M хорошо аппроксимировала матрицу A . Два указанных требования вступают в противоречие, поскольку чем ближе матрица M к матрице A , тем более вероятно, что решение системы $M\hat{r} = r$ окажется почти таким же трудным, как решение системы $Ax = b$.

Следует уточнить, как понимается аппроксимация матрицы A матрицей M . В силу (4.5.56) и (4.5.59) предобусловленная матрица $\hat{A}$ удовлетворяет соотношению

$$S^T \hat{A} S^{-T} = S^T S A = M^{-1} A, \quad (4.5.60)$$

Отсюда видно, что матрица $M^{-1}A$ подобна матрице $\hat{A}$, и потому число обусловленности предобусловленной матрицы равно отношению наибольшего собственного значения матрицы $M^{-1}A$ к ее наименьшему собственному значению:

$$\text{cond}(\hat{A}) = \lambda_{\max}(M^{-1}A) / \lambda_{\min}(M^{-1}A). \quad (4.5.61)$$

Поскольку целью является уменьшение числа обусловленности матрицы $\hat{A}$ настолько, насколько это возможно, то критерием близости матрицы M к A будет служить малость отношения наибольшего собственного значения матрицы $M^{-1}A$ к наименьшему.

Одним из подходов, позволяющих сократить вычисления, является прием Айзенштата (Eisenstat, 1981), который сводится к применению метода (4.5.58) к модифицированной системе. Основная идея такого подхода состоит в том, что если матрицы A и M имеют схожую структуру, то вычисление Ap и решение предобусловленной системы (4.5.58д) может содержать общие операции. Анализ и сравнение такого рода приемов приводится в работе (Ortega, 1987). Исключить вычисление дополнительного скалярного произведения можно за счет использования условия $(\hat{r}^{k+1}, r^{k+1}) < \varepsilon$ в качестве первой проверки сходимости метода. В случае выполнения этого условия желательна дополнительная проверка нормы невязки $\|r^{k+1}\|_2 < \varepsilon$. Однако, такой подход теоретически может приводить к увеличению числа итераций. Общее изложение способов построения матрицы M и обсуждение вопросов, связанных с решением системы (4.5.58д), можно найти в (Saad, 2003).

Предобусловливание при помощи усеченных рядов. Пусть A – невырожденная матрица $n \times n$, а $A = P - Q$ – такое расщепление матрицы A , что матрица P является невырожденной, а наибольший из модулей собственных значений матрицы $P^{-1}Q$ не превосходит единицы. Тогда

$$A^{-1} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} H^k \right) P^{-1}, \quad (4.5.62)$$

где $H = P^{-1}Q$. Доказательство следует из разложения Неймана. Ряд, включающий матрицу H , сходится и его сумма равна $(I - H)^{-1}$. Но $A = P - Q = P(I - H)$, откуда и следует требуемый результат. Основываясь на разложении (4.5.62), можно рассматривать матрицы

$$M = P(I + H + \dots + H^{m-1})^{-1}, \quad (4.5.63a)$$

$$M^{-1} = (I + H + \dots + H^{m-1})P^{-1} \quad (4.5.63b)$$

как аппроксимации матриц A и A^{-1} соответственно. Тогда решение вспомогательной системы $M\hat{r} = r$ можно найти с использованием соотношения

$$\hat{r} = M^{-1}r = (I + H + \dots + H^{m-1})P^{-1}r. \quad (4.5.64)$$

Для этого не нужно явно формировать матрицы H и указанный усеченный ряд. Вместо этого достаточно заметить, что вектор $\hat{r}$, заданный (4.5.64), является результатом m шагов итерационного метода

$$Pr^{i+1} = Qr^i + r, \quad i = 0, 1, \dots, m-1, \quad r^0 = 0, \quad (4.5.65)$$

и положить $\hat{r} = r^m$. В качестве итерационного метода (4.5.65) можно использовать описанные выше методы Якоби, метод SOR и симметричный метод SSOR. Однако, методы Гаусса-Зейделя и SOR не позволяют получить симметричную положительно определенную матрицу M , что требуется для метода сопряженных градиентов. Тем не менее, для других итерационных методов без данных ограничений возможно использование указанных методов. Скорость сходимости предобусловленного метода сопряженных градиентов определяется как выбором матриц P и Q , так и числом шагов m в итерационном методе (4.5.65). При этом в общем случае величина $\text{cond}(\hat{A})$ может и не быть убывающей функцией от m (Ortega, 1987). Некоторые особенности реализации предобусловливателей вида (4.5.63) для параллельных архитектур рассматриваются в работе (Adams, 1985).

Многосеточные методы. Первые исследования многосеточных методов начались с работ российских математиков Федоренко (1961), Бахвалова (1966) и Астраханцева (1971). Однако эти работы не привлекли широкого внимания, и только начиная с публикаций (Brandt, 1973, 1977), метод получил признание. Многосеточные методы подробно рассматриваются в книгах (Hackbusch, 1985, Шайдуров, 1989) и учебных пособиях (Wesseling, 1992, Василевский и Ольшанский, 2007). Многосеточные методы были предложены для решения дифференциальных уравнений с частными производными типа уравнения Пуассона, однако они пригодны для более широкого класса задач. В отличие от рассмотренных выше итерационных схем, скорость сходимости многосеточного метода, будучи независимой от размера N сетки, не замедляется для больших систем. Как следствие, задачи с n неизвестными оказывается возможным решать за время $O(n)$, т. е. затрачивая фиксированный объем вычислений на каждое неизвестное.

В многосеточных методах грубые сетки используются для реализации стратегии «разделяй-и-властвуй» двумя способами. Во-первых, начальное решение для сетки $N \times N$ строится посредством аппроксимирующей сетки $\left(\frac{N}{2}\right) \times \left(\frac{N}{2}\right)$, получаемой удержанием каждого второго узла исходной сетки $N \times N$. Более грубая сетка $\left(\frac{N}{2}\right) \times \left(\frac{N}{2}\right)$, в свою очередь, аппроксимируется сеткой $\left(\frac{N}{4}\right) \times \left(\frac{N}{4}\right)$, и так далее. Второй способ использования стратегии «разделяй-и-властвуй» относится к частотной области. Здесь погрешность представляется как сумма собственных векторов или синусоид с различными частотами. Вычисления, выполняемые на конкретной сетке, уменьшают половину частотных компонент погрешности, для которых таковое не было достигнуто на более грубых сетках. В частности, усреднение приближенного решения в каждом узле сетки с использованием соседних узлов, что представляет собой некоторый вариант метода Якоби, сглаживает приближенное решение, что эквивалентно подавлению высокочастотных компонент погрешности.

Пусть $P^{(i)}$ означает задачу решения дискретного уравнения Пуассона на сетке размера $(2^i + 1) \times (2^i + 1)$ с $(2^i - 1)^2$ неизвестными, иначе говоря, на сетке размера $(N_i + 2) \times (N_i + 2)$ с N_i^2 неизвестными. Задача $P^{(i)}$ характеризуется правой частью $b^{(i)}$ и (неявно) размером сетки $2^i - 1$ и матрицей коэффициентов $T^{(i)} = T_{N_i \times N_i}$. Пусть также приближенное решение задачи $P^{(i)}$ обозначено как $x^{(i)}$. Таким образом, $b^{(i)}$ и $x^{(i)}$ суть массивы размера $(2^i - 1) \times (2^i - 1)$, составленные из значений в узлах сетки (нулевые граничные значения присутствуют неявно). Необходимо построить последовательность связанных задач $P^{(i)}, P^{(i-1)}, P^{(i-2)}, \dots, P^{(1)}$ на все более грубых сетках; при этом решение задачи $P^{(i-1)}$ будет хорошим приближением погрешности решения задачи $P^{(i)}$.

Пусть S – оператор сглаживания, который для задачи $P^{(i)}$ с приближенным решением $x^{(i)}$ вычисляет уточненное приближение $x^{(i)}$:

$$x^{(i)} = S(b^{(i)}, x^{(i)}). \quad (4.5.66)$$

Уточнение состоит в подавлении «высокочастотных компонент» погрешности. Оператор сужения R задается как отображение правой части $b^{(i)}$ задачи $P^{(i)}$ в ее приближение $b^{(i-1)}$ на более грубой сетке:

$$b^{(i-1)} = R(b^{(i)}). \quad (4.5.67)$$

Наконец, оператор интерполяции In соответствует преобразованию приближенного решения $x^{(i-1)}$ задачи $P^{(i-1)}$ в приближенное решение $x^{(i)}$ задачи $P^{(i)}$ на более мелкой сетке:

$$x^{(i)} = In(x^{(i-1)}). \quad (4.5.68)$$

Все три оператора выполняются путем замены текущих значений в каждом узле сетки некоторыми взвешенными средними по ближайшим соседним узлам. Поэтому каждый оператор производит работу $O(1)$ на одно неизвестное или работу $O(n)$ для всех n неизвестных. Этим объясняется низкая стоимость алгоритма в целом.

Многосеточный V-цикл. С помощью построенных отображений можно сформулировать основной алгоритм – так называемый многосеточный V-цикл (Demmel, 1997):

function **MGV**($b^{(i)}, x^{(i)}$)

(заменяет приближенное решение $x^{(i)}$ задачи $P^{(i)}$ уточненным приближением)

if $i = 1$ (случай одного неизвестного)

 вычислить точное решение $x^{(1)}$ задачи $P^{(1)}$

 возвратить $x^{(1)}$

else

(1) $x^{(i)} = S(b^{(i)}, x^{(i)})$... найти улучшенное приближение,

(2) $r^{(i)} = T^{(i)} x^{(i)} - b^{(i)}$... вычислить невязку,

(3) $d^{(i)} = \text{In}\left(\text{MGV}\left(4R(r^{(i)}), 0\right)\right)$... использовать рекурсию по более грубым
... сеткам

(4) $x^{(i)} = x^{(i)} - d^{(i)}$... уточнить решение на мелкой сетке

(5) $x^{(i)} = S(b^{(i)}, x^{(i)})$... снова уточнить приближенное решение

(6) вернуть $x^{(i)}$

endif

Алгоритм начинает работу с задачей на мелкой сетке, характеризуемой векторами $b^{(i)}$ и $x^{(i)}$. Затем он улучшает текущее приближение, подавляя высокочастотную погрешность: $x^{(i)} = S(b^{(i)}, x^{(i)})$. Далее вычисляется невязка $r^{(i)}$ приближенного решения $x^{(i)}$. Невязку $r^{(i)}$ для мелкой сетки аппроксимируется с помощью соседней, более грубой сетки: $R(r^{(i)})$. Задача на более грубой сетке решается рекурсивно при нулевом начальном приближении: $\text{MGV}\left(4R(r^{(i)}), 0\right)$. Коэффициент 4 обязан своим происхождением множителю h^2 в правой части уравнения Пуассона и он изменяется ровно в 4 раза при переходе от мелкой сетки к грубой. Решение, полученное на грубой сетке, интерполируется на более мелкую сетку: $d^{(i)} = \text{In}\left(\text{MGV}\left(4R(r^{(i)}), 0\right)\right)$. Вычитается поправка, вычисленная с помощью грубой сетки, из приближенного решения на мелкой сетке: $x^{(i)} = x^{(i)} - d^{(i)}$. И, наконец, снова уточняется текущее приближение: $x^{(i)} = S(b^{(i)}, x^{(i)})$.

Полный многосеточный метод. Окончательный алгоритм, называемый полным многосеточным методом (**FMG**), использует описанный выше алгоритм **MGV** как «строительный» блок:

function **FMG**($b^{(k)}, x^{(k)}$)

(вычисляет приближенное решение $x^{(k)}$ хорошей точности для задачи $P^{(k)}$)

 решить задачу $P^{(1)}$ точно, определив $x^{(1)}$

for $i = 2$ to k

$x^{(i)} = \text{MGV}(b^{(i)}, \text{In}(x^{(i-1)}))$

end for

Вначале алгоритм точно решает самую простую задачу $P^{(1)}$. Затем, при имеющемся решении $x^{(i-1)}$ более грубой задачи $P^{(i-1)}$, отображает $x^{(i-1)}$ в начальное приближение $x^{(i)}$ задачи $P^{(i)}$ на более мелкой сетке: $In(x^{(i-1)})$. Далее решается задача на более мелкой сетке с указанным начальным приближением, пользуясь при этом алгоритмом *MGV*: $MGV(b^{(i)}, In(x^{(i-1)}))$. Реализации многосеточных методов на параллельных архитектурах рассматриваются, например, в работе (Gannon and van Rosendale, 1986).

4.6. Проблемы масштабируемости на разных вычислительных архитектурах

В настоящее время существует множество технологий параллельного программирования, ориентированных на использование различных процессорных архитектур и организации оперативной памяти суперкомпьютера (см. раздел 4.2). В настоящем разделе рассмотрены особенности применения наиболее употребительных технологий программирования в задачах геофизической гидротермодинамики, способы повышения эффективности программных кодов, а также перспективы и возможные ограничения дальнейшего использования этих технологий в данной предметной области с учетом современных тенденций развития суперкомпьютерной техники.

Вначале следует остановиться на характеристиках эффективности параллельной реализации моделей. Параллельное ускорение программы определяется как $R = T_1 / T_n$, где T_1 – время выполнения программы на одном процессоре (вычислительном ядре), T_n – время ее выполнения на n процессорах. Эффективность параллельной программы определяется как отношение ускорения к числу использованных процессоров $E = R / n$. Эта величина обычно выражается в процентах. Как правило, эффективность падает с ростом числа процессоров, однако нередко случается, что при небольшом n эффективность превышает 100%, что называют сверхлинейным ускорением (см. ниже). Говорят, что программа ускоряется (или масштабируется) линейно, если эффективность мало меняется с ростом n . Ускорение и эффективность – наглядные понятия, и они часто используются при характеристике работы параллельных приложений, однако, не дают информации о производительности программы в терминах скорости вычислений. Скорость вычислений, выражаемая, как правило, в Мфлопс (Mflops – Mega floating point operations per second), на каждом процессоре компьютера с распределенной памятью зависит не только от эффективной организации межпроцессорных коммуникаций (своевременное получение необходимых данных от других процессоров позволяет данному процессору не простаивать в ожидании этих данных), но и от скорости обращения к локальной оперативной памяти.

Поскольку, как указывалось в разделе 4.1, скорость вычислений в гидродинамических приложениях на одном процессоре не превосходит нескольких процентов от пиковой производительности процессора, то такую скорость можно считать эталонной для многопроцессорных версий этих приложений. Обычно используют среднюю по всем используемым процессорам скорость вычислений (производительность). С практической точки зрения, очень показательной характеристикой также является скорость прогноза, определяемая как интервал модельного времени, рассчитанный в единицу машинного времени. Она является наиболее «интегральной» в том смысле, что определяется не только параллельной реализацией программного кода, аппаратными особенностями многопроцессорной системы, но также и численной схемой, в частности, величиной шага по времени. Так, явные конечно-разностные схемы в силу критерия Куранта имеют, как правило, меньший шаг по времени, чем неявные схемы. В то же время, если в схеме применяются неявные аппроксимации вдоль осей, по которым производится разбиение по MPI-процессам, явная схема для той же системы уравнений распараллеливается проще и эффективнее. Таким образом, в общем случае не

представляется возможным заключить, какой класс схем по времени более перспективен с точки зрения скорости прогноза.

Реализация и масштабируемость MPI-программ. В большинстве атмосферных и океанических моделей, адаптированных к многопроцессорным вычислительным системам, используется интерфейс явного обмена сообщениями MPI, что вызвано доступностью и высокой масштабируемостью кластерных систем. В кластерах оперативная память распределяется между процессорами (вычислительными ядрами), так что каждый процессор имеет доступ только к локальной памяти. Это обуславливает основной подход к MPI-реализации численного решения уравнений гидротермодинамики, который заключается в разбиении (декомпозиции) расчетной области между MPI-процессами. При этом каждый процесс производит обработку (в соответствии с численной схемой) элементов массивов зависимых переменных только в тех узлах сетки, которые находятся в его подобласти. Поскольку для этой обработки, как правило, требуется информация о значениях элементов массивов из других подобластей, производятся взаимные пересылки данных между процессами. Используются разные декомпозиции в зависимости от характеристик расчетной области и используемого численного метода. Так, в моделях пограничного слоя размеры области интегрирования по трем направлениям близки, поэтому целесообразно трехмерное разбиение. В региональных и глобальных моделях горизонтальные размеры расчетной области на порядок и более превосходят вертикальный размер, поэтому используются разбиения только по горизонтальным направлениям.

При использовании конечно-разностных схем часть узлов пространственного шаблона на границе подобласти выходит за ее пределы, т. е. для применения шаблона требуется пересылка соответствующих элементов от «соседнего процесса» (процесса, подобласть которого граничит с подобластью данного). Очевидно, что количество пересылок в таком случае пропорционально «площади поверхности» подобласти. Количество же арифметических операций (для простоты можно ограничиться явными схемами) пропорционально «объему» подобласти, т. е. количеству узлов сетки, лежащих в ней. Отношение площади поверхности прямоугольного параллелепипеда к его объему ($\sim$ количество обменов/количество арифметических операций) минимально для куба, значит, размеры подобластей по трем направлениям не должны сильно отличаться. В региональных и, тем более, глобальных моделях введение разбиения по вертикальной координате приведет, наоборот, к «сплющиванию» подобластей. Вторым неудобным следствием введения вертикального разбиения является необходимость в этом случае реализовывать неявные по вертикали схемы, которые используются во многих моделях, например, для вертикальной диффузии, в условиях разбиения данных на каждой вертикали по процессам. Алгоритмы параметризации радиационных процессов, которые в большинстве случаев одномерны по вертикали, также потребовали бы модификации для случая разбиения данных.

Разбиение на подобласти по горизонтали зависит от подхода к дискретизации системы уравнений. В конечно-разностных моделях используют двумерное разбиение по x и y (или широте и долготе). Это разбиение позволяет эффективно реализовывать явные схемы, однако при решении уравнения Пуассона для давления (или геопотенциала) прямым методом, приходится транспонировать массивы, как показано в разделе 4.3. В спектральных моделях, где на каждом шаге по времени необходимо производить быстрое преобразование Фурье (БПФ) по долготе и преобразование Лежандра по широте, в качестве основного разбиения используется одномерное разбиение по широте, так что БПФ производится только над элементами, хранящимися в локальной памяти. Чтобы произвести преобразование Лежандра, применяется транспонирование широтного разбиения в долготное.

При использовании небольшого количества MPI-процессов нередко наблюдается явление сверхлинейного ускорения. Оно, как правило, связано с тем, что при уменьшении

размера подобластей и, следовательно, размеров локальных массивов, значительная часть элементов массивов может храниться в кэш-памяти, так что обработка этих массивов значительно ускоряется.

Как отношение площади поверхности параллелепипеда к его объему увеличивается при уменьшении объема, так же ведет себя и отношение времени, затрачиваемого на MPI-пересылки, ко времени, занятому вычислениями, при реализации явных схем уравнений гидротермодинамики. Соответственно, падает эффективность программы. В то же время, физические параметризации, например, параметризации фазовых переходов или основанные на одномерных уравнениях модели деятельного слоя суши и переноса радиации в атмосфере, хорошо масштабируются при любых размерах подобластей, поскольку не требуют пересылок данных при двумерном (по горизонтали) разбиении. Таким образом, возникает возможность использования разного количества MPI-процессов для блока параметризаций и схемы решения уравнений гидротермодинамики (т. н. динамического блока), что реализовано, например, в работе (Mirin and Worley, 2007). Для оптимизации такой схемы распараллеливания требуется, однако, чтобы общее количество запускаемых MPI-процессов определялось наиболее масштабируемым блоком параметризаций, так что во время работы динамического блока часть процессов будет простаивать.

В большинстве атмосферных и климатических моделей производится декомпозиция области интегрирования по MPI-процессам на равные по размеру подобласти. Однако это не всегда приводит к равной вычислительной загрузке процессов. Так, в совместных моделях океана и атмосферы количество вычислений, реализующих оператор шага по времени, в «океанических» точках часто значительно больше, чем в точках суши. Это вызвано большей вычислительной сложностью моделей гидротермодинамики океана по сравнению с моделями деятельного слоя суши. Поэтому в Немецком климатическом вычислительном центре (Гамбург) реализована нерегулярная декомпозиция глобальной сетки климатической модели, так что объем подобласти обратно пропорционален отношению площади моря к площади суши в ней. Такую балансировку вычислительной нагрузки между процессами естественно назвать статической. Динамическая балансировка целесообразна в том случае, когда невозможно предсказать вычислительную нагрузку разных процессов перед началом счета. Например, если используется сложная параметризация микрофизических процессов (фазовых переходов) (Lieber et al., 2010), то в областях пространства с развитой конвективной облачностью вычислительная нагрузка заметно повышается по сравнению с безоблачными районами. В этом случае для блока микрофизики и уравнений переноса-диффузии влаги в разных фазовых состояниях используется автономное динамическое распределение данных между процессами, независимое от основного разбиения: указанные поля распределяются между процессами так, чтобы минимизировать различие между ними в вычислительной нагрузке. При этом, разумеется, необходима процедура прямого и обратного перевода полей из основного разбиения модели в разбиение микрофизического блока.

Другой путь повышения масштабируемости MPI-приложений состоит в повышении скорости пересылок данных между процессами. Здесь можно отметить два подхода: группировка пересылок и упаковка сообщений. Поскольку время передачи сообщения есть сумма времени на передачу самих данных и времени, определяемого характеристиками коммуникационной сети (в частности, латентностью сети), то при прочих равных условиях выгоднее отправить множество данных одним сообщением, а не отдельными порциями (группировка пересылок). Смысл упаковки заключается в сжатии данных перед отправкой (Kumar et al., 2008). При этом сжатие данных может быть достигнуто без потери информации и с потерей ее. В последнем случае достигается меньший объем данных сообщений, но теряется строгая эквивалентность параллельной и последовательной версий модели, что в некоторых приложениях может оказаться существенным, например, при высокой чувствительности модели к начальным данным.

Возмущение, вносимое при пересылках сжатых с потерей информации сообщений на первом шаге интегрирования, эквивалентно возмущению начальных условий, если в качестве новых начальных условий считать поля прогностических величин на втором шаге.

Из изложенного выше ясно, что масштабируемость MPI-приложений зависит от многих факторов, составляющих цепочку «численный алгоритм – программа – многопроцессорный компьютер». Поэтому полезным оказался подход построения аналитических моделей ускорения параллельного кода геофизической модели (Skålin, 1997). Его суть заключается в том, что оценивается количество операций с плавающей запятой для конечно-разностной схемы в целом или отдельных ее алгоритмов, а также количество и размеры MPI-сообщений для этих алгоритмов. Таким образом, в выражение для времени выполнения параллельной программы в целом, наряду с параметрами численного алгоритма, входят также характеристики аппаратной среды, такие как латентность и время передачи по коммуникационной сети одного слова информации. Проверка модели заключается в сравнении ускорения, полученного в численных экспериментах с геофизической моделью при разном количестве процессоров, с ускорением, рассчитанным по модели. Используя эти данные, можно сделать вывод о том, какие параметры нужно оптимизировать для получения максимальной масштабируемости программного кода.

Гибридные MPI+OpenMP модели. Случаи реализации численных моделей гидротермодинамики атмосферы и океана исключительно с использованием OpenMP довольно редки, поскольку, как было сказано в разделе 4.1, по техническим причинам над общей памятью сложно объединить количество процессоров более нескольких сотен и поэтому такие системы довольно дороги. В то же время, развитие гибридных MPI+OpenMP геофизических моделей стало естественным следствием развития суперкомпьютеров, среди которых в последнее время преобладают кластеры, вычислительные узлы которых представляют собой мультипроцессоры той или иной архитектуры. Гибридные коды развиваются, как правило, на основе исходных MPI-программ, в которые включаются инструкции OpenMP для распараллеливания циклов. Таким образом, внутри каждой MPI-подобласти выделяются подобласти второго уровня, так что в пределах соответствующих интервалов индексов обработка массивов происходит нитями OpenMP (Mininni et al., 2010). Следует отметить, что несмотря на отсутствие обменов данных по коммуникационной сети в рамках OpenMP, эффективность OpenMP-программ во многих случаях оказывается невысокой. В частности, это связано с тем, что вычислительные узлы над общей памятью зачастую имеют сложную иерархию кэш-памяти, с адресацией по принципу NUMA (non-uniform memory access), в результате чего скорость доступа к разным ячейкам единой памяти может оказаться очень различной. Это, в свою очередь, вызывает дисбаланс в выполнении отдельных нитей OpenMP.

В настоящее время для моделей геофизической гидротермодинамики с использованием процессорных архитектур общего назначения и технологий параллельного программирования MPI и OpenMP, активно внедряемых в данной предметной области в течение последних двух десятилетий, удастся получить хорошую масштабируемость этих кодов до десятков тысяч процессоров. В частности, в работе (Taylor et al., 2008) демонстрируется масштабируемость атмосферной составляющей модели CCSM (Community Climate System Model) до 86200 процессоров компьютера IBM Blue Gene L. Несмотря на такие успехи использования ставших уже традиционными подходов, следует иметь в виду их ограничения. Во-первых, системы с таким количеством процессоров (вычислительных ядер) остаются уникальными и их ресурсы доступны ограниченному кругу пользователей. Во-вторых, высокое ускорение при использовании большого количества «традиционных» процессоров достигается при использовании только достаточно больших размеров численной сетки (например, в цитированной выше работе в расчетах на сетках с горизонтальным разрешением 1.4°, 0.5° и 0.25° оказалось

возможным эффективным использованием до 1536, 21600 и 86200 процессоров, соответственно). Это связано с упомянутым повышением отношения «количество MPI-обменов – количество вычислительных операций» при уменьшении подобластей разбиения по MPI-процессам.

Модели с использованием графических процессоров. Новый перспективный подход к повышению производительности геофизических моделей заключается в использовании процессоров новой архитектуры, среди которых особой популярностью в последнее время пользуются процессоры GPU (раздел 4.2). Эти процессоры реализуют концепцию множества вычислительных потоков, организованных над общей памятью. Так, в процессоре G80 компании NVIDIA присутствует 128 вычислительных ядер, реализующих 12288 потоков/нитей (Калачев, 2010). Пиковая производительность процессора составляет 518 Гфлопс, в то время как тот же показатель для всех представителей семейства Intel Xeon составляет менее 100 Гфлопс. Таким образом, при объединении одинакового количества «традиционных» процессоров и графических процессоров в сеть с передачей данных по протоколу MPI, приложения на кластере с графическими процессорами могут демонстрировать в несколько раз (на практике – в 10-20 раз) бóльшую производительность. Однако за такой выигрыш в производительности разработчику программы приходится «платить» необходимостью осваивать язык программирования, отличный от привычных языков высокого уровня (Fortran, C/C++). Дело в том, что оперативная память графических процессоров устроена в соответствии со сложной иерархией, и потому обращения к различным видам памяти приходится прописывать в программе явно. Для этого создан язык CUDA, подробнее рассмотренный в разделе 4.2. Этот язык изначально представлял собой надстройку над языком C, однако в 2010 г. компания The Portland Group совместно с NVIDIA выпустила компилятор для аналогичной надстройки над языком Фортран, что важно, поскольку большинство геофизических моделей написано на Фортране.

В настоящее время существует несколько примеров удачной адаптации кодов геофизических моделей для графических процессоров, которые подтверждают перспективность этого направления ускорения решения данного класса задач. В силу трудоемкости перевода программного кода, написанного на Фортране, в код CUDA, ряд работ (например, Kelly, 2010, Michalakes and Vachhjarajani, 2008) посвящен реализации для GPU отдельных блоков атмосферных моделей. В цитированных работах на основе CUDA реализованы блок микрофизики и блок расчета солнечной радиации, соответственно, и в обоих случаях получены увеличения производительности на одном графическом процессоре NVIDIA до 20 раз в сравнении с процессорами Intel и IBM. В качестве примера реализации полной модели геофизической гидротермодинамики на CUDA можно привести работу (Schalkwijk et al., 2011), в которой на одном процессоре CUDA реализована вихреразрешающая (LES) модель. Результаты этой работы не дают, однако, возможности сделать вывод о существенном ускорении полной модели на GPU в сравнении с ее запуском на традиционных процессорах.

Осуществлены также первые опыты реализации численных схем решения уравнений гидротермодинамики на кластерах, на которых в качестве вычислительных узлов используются процессоры GPU. Так, в работе (Мортиков, 2012) алгоритм решения нескольких задач гидродинамики методом погруженной границы реализован на GPU-кластере с применением гибридного программирования MPI+CUDA, а также на центральном четырехъядерном процессоре Intel с использованием OpenMP. Показано, что время вычислений для ключевых составляющих алгоритма на одной карте GPU с ростом количества узлов сетки увеличивается значительно медленнее, чем при использовании процессора Intel.

В настоящее время в обоих направлениях параллельной реализации кодов моделей геофизической гидротермодинамики – наращивание масштаба кластерных решений на основе традиционных процессорных архитектур и переход к использованию новых

мультимикропроцессоров – имеется перспектива дальнейшего повышения масштабируемости. В первом случае это достигается путем тонкой балансировки вычислительной нагрузки между микропроцессорами и сокращения накладных расходов на передачу данных по коммуникационной сети. Во втором случае сделаны только первые шаги в использовании микропроцессорных систем на основе графических микропроцессоров, хотя производительность отдельных компонент численных алгоритмов геофизических моделей на одном микропроцессоре оказывается на порядок выше, чем при использовании традиционных микропроцессоров.

ГЛАВА 5

ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ФИЗИКИ КЛИМАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

5.1. Численное моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации.

Развитие графических процессоров в последнее десятилетие вызвало рост интереса к возможности использования графических карт в качестве математических сопроцессоров для проведения расчетов, связанных с численным моделированием. Распространение специализированных сред программирования (CUDA, OpenCL) способствует появлению реализаций математических моделей, в которых перенос вычислений на новую архитектуру связан не с целью визуализации обрабатываемых данных, а с целью ускорения программ для описания моделируемых явлений. Существующие алгоритмы, основанные на решении сеточных уравнений Навье-Стокса, не очень эффективны при реализации на графических процессорах, что связано с необходимостью решения уравнения Пуассона, а также учета криволинейных границ при решении задач в сложных областях. Выбор подходящего метода для решения эллиптических уравнений зависит от класса решаемых задач, численной схемы и типа дискретной сетки, покрывающей область. Для ряда задач возможно применение эффективных многосеточных методов (Шайдуров, 1989), которые демонстрируют хорошие результаты при переходе на архитектуру графических процессоров (Boltz et al., 2003). К другим распространенным методам решения уравнения Пуассона относятся итерационные методы градиентного типа (van der Vorst, 2003), однако их быстродействие сильно зависит от выбора предобусловливателя с учетом особенностей вычислительной архитектуры и программной модели.

В работах (Мортиков, 2010, 2012) предложена вычислительная технология, реализованная на графических процессорах (как на отдельной графической карте, так и на кластере, объединяющем несколько устройств), позволяющая в контексте разнообразных гидродинамических моделей моделировать на основе метода погруженной границы течения в сложных областях. Основными требованиями к методу представления криволинейной границы являются независимость от конкретной модели, а также достаточная точность аппроксимации краевых условий и достоверное описание пограничного слоя.

Программная реализация на графических процессорах. Систему линейных уравнений, соответствующую дискретизации уравнения (3.4.4) центральными разностями второго порядка, можно записать в виде:

$$A_p x = b_p, \quad A_p = L + D + L^T, \quad (5.1.1)$$

где D – диагональная, а L – нижняя треугольная часть матрицы A_p с нулевой диагональю. Выбор подходящего предобусловливателя M для матрицы системы ($A_p = M + N$, $Nx \approx 0$) в методе сопряженных градиентов приводит к уменьшению числа обусловленности и, как следствие, к существенному увеличению скорости сходимости. В большинстве работ, посвященных реализациям итерационных методов на графических процессорах, применяется предобусловливатель Якоби или его блочный аналог (Buatois et al., 2009). Такой подход позволяет эффективно использовать особенности архитектуры, однако, сильно проигрывает более сложным предобусловливателям в отношении уменьшения числа обусловленности системы уравнений. Для предобусловливателей вида $M = LU$ (L – нижняя, U – верхняя треугольные матрицы) в общем случае разреженной матрицы A возникают трудности с реализацией быстрого обращения M на графических

процессорах и распределением вычислений на отдельные параллельные потоки. Подходящим выбором для вычислений на графических устройствах представляются методы, в которых считается, что известна аппроксимация обратной матрицы системы $M^{-1} \approx A_p^{-1}$ (Cosgrove et al., 1992, Benzi et al., 1996). В этом случае дополнительные операции, вызванные переходом к предобусловленной системе, сводятся к умножению матрицы на вектор. Тем не менее, как правило, обратная матрица приближается разреженной матрицей, что по мере усложнения структуры исходной матрицы приводит к заметному ухудшению результатов (Dongarra et al., 1998).

При решении системы (5.1.1) с матрицей A_p в условиях задачи (3.4.1) интересно сравнить реализации на графических процессорах нескольких вариантов предобусловливателей:

$$M_J = D, \quad (5.1.2)$$

$$M_{SSOR} = \frac{1}{2-\omega} \left(\frac{1}{\omega} D + L \right) \left(\frac{1}{\omega} D \right)^{-1} \left(\frac{1}{\omega} D + L \right)^T, \quad (5.1.3)$$

$$M_{AIP}^{-1} = (I - LD^{-1})(I - D^{-1}L^T), \quad (5.1.4)$$

где M_J соответствует методу Якоби, M_{SSOR} – методу симметричной последовательной верхней релаксации, а предобусловливатель M_{AIP} предложен в работе (Ament et al., 2010) для решения сеточного уравнения Пуассона и относится к методам аппроксимации обратной матрицы. Для реализации предобусловливателя M_{SSOR} на графических процессорах удобно применить переупорядочивание узлов сетки в шахматном порядке и использовать значение параметра $\omega = 1$, что соответствует симметричному методу Гаусса-Зейделя. В качестве предобусловливателя можно также рассмотреть геометрический многосеточный метод с V-циклом для матрицы (5.1.3) с переупорядочиванием узлов.

Важной особенностью архитектуры графических процессоров является существенная неоднородность типов памяти устройства. Одной из проблем при реализации предобусловленного метода сопряженных градиентов на данной архитектуре является большое число точек синхронизации вычислений, что приводит к увеличению операций чтения/записи для данных в медленной глобальной памяти устройства и сокращению числа вычислений в быстрой памяти. Повысить эффективность реализации итерационного метода на графических процессорах удастся за счет выполнения асинхронных операций копирования памяти устройства и группировки операций для уменьшения обращений к памяти. Модификации метода сопряженных градиентов (Chronopoulos and Gear, 1989, Demmel et al., 1993) позволяют использовать часть данных особенностей архитектуры. Заметного улучшения производительности удастся добиться при сочетании предобусловливателя (5.1.4) и варианта метода сопряженных градиентов, предложенного в статье (Demmel et al., 1993). В этом алгоритме предполагается, что предобусловливатель можно записать в виде $M = LL^T$, а обращение матрицы M разбивается на несколько шагов, причем обновление значения вектора приближенного решения откладывается на следующую итерацию. Если матрица M определяется соотношением (5.1.4), то решение системы с матрицей предобусловливателя заменяется умножением нижне-треугольной и верхне-треугольной матрицы на вектор. Такой подход позволяет совместить вычисления и значительную часть обменов данными между центральным и графическим процессором и взаимодействие между отдельными устройствами.

Для решения системы линейных уравнений (3.4.14) с симметричной матрицей A_b при аппроксимации краевых условий методом погруженной границы можно использовать модификацию метода сопряженных градиентов с предобусловливателем Якоби

(Chronopolous and Gear, 1989), что позволяет проводить единственный обмен данных с устройством на каждой итерации. Этот вариант является менее устойчивым по сравнению с классическим методом и обладает большей зависимостью от распределения точек погруженной границы на сетки, характеризуемым соотношением $\Delta l/h$, где h – шаг сетки, а Δl – элемент длины (площади) криволинейной границы. В приводимых ниже расчетах полагалось $\Delta l/h \approx 0.785$, что не приводит к существенному увеличению числа итераций, достаточных для сходимости метода. Однако, при уменьшении значения $\Delta l/h$ в ряде численных расчетов наблюдалось заметное увеличение числа итераций, не характерное для классического метода сопряженных градиентов. Число узлов сетки намного превосходит число точек, выбранных для описания криволинейных границ. Это приводит к тому, что аппроксимацию краевых условий (3.4.14) и (3.4.15), а также определение коэффициентов сопротивления (3.4.16) и (3.4.17), эффективнее проводить для некоторых задач на центральном процессоре. Тем не менее, разделение части вычислений требует дополнительных операций копирования из памяти устройства и существенно сказывается на производительности. Наиболее предпочтительным представляется выполнение всех численных расчетов на графическом процессоре. Данные, связанные с погруженными границами, группировались в один массив и для всех криволинейных границ решалась система (3.4.14) с блочно-диагональной матрицей, что необходимо для достаточной загруженности вычислительных элементов. Важно заметить, что в некоторых задачах возможно более эффективным было бы разделение погруженных областей по числу точек и значению $\Delta l/h$.

Для организации вычислений на графических процессорах применялась технология программирования CUDA. Расчеты проводились на кластере из восьми графических процессоров Nvidia Tesla T10 второго поколения (<http://tesla.parallel.ru>) и на суперкомпьютере “ГрафИТ!/GraphIT!” (<http://gpu.parallel.ru/graphit.html>), где в расчетах использовалось до 15 карт Nvidia “Fermi” Tesla M2050. Обмены данными при работе с несколькими устройствами осуществлялись с помощью функций библиотеки MPI. Рассматривалась декомпозиция двумерной области на вычислительные узлы по одной и двум координатам. На каждой графической карте в рамках среды CUDA потоки группировались в сетку, состоящую из одномерных или двумерных блоков в зависимости от типа операции. Количество нитей, объем общей памяти для нитей блока и количество регистров определялись на основе численных экспериментов для отдельных функций. Для проведения сравнений и оценки быстродействия расчетов на графических процессорах использовалась реализация рассмотренного в разделе 3.4 численного метода на центральном процессоре (Intel Xeon 5472 3.0Hz, СКИФ МГУ “Чебышев”). Распределение вычислений на ядра процессора реализовано с помощью библиотеки OpenMP.

Эта вычислительная технология была использована для моделирования ряда двумерных течений вязкой несжимаемой жидкости вокруг неподвижного кругового цилиндра, группы круговых цилиндров, кругового цилиндра, совершающего вынужденные колебания. Область Ω , в которой рассматриваются уравнения (3.4.1), в расчетах представляет собой прямоугольник со следующими граничными условиями для вектора скорости $\vec{u} = (u, v)$:

$$u = U_{\infty}, \quad v = 0 \quad \text{на } \Gamma_W, \quad (5.1.5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad v = 0 \quad \text{на } \Gamma_S \text{ и } \Gamma_N, \quad (5.1.6)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + U_0 \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} = 0 \quad \text{на } \Gamma_E, \quad (5.1.7)$$

где Γ_W и Γ_E – западная и восточные стороны области Ω , Γ_S и Γ_N – ее северная и южная границы, U_0 определяет скорость переноса на выходе из области, которую можно определить равной U_∞ или вычислять осреднением по контуру Γ_E значений продольной компоненты скорости (Ol'shanskii and Staroverov, 2000). Условия (5.1.7) для численного моделирования выбранных задач более предпочтительны, что обусловлено нестационарным характером рассматриваемых течений. При этом граница Γ_E в расчетах предполагалась достаточно удаленной от криволинейных границ с тем, чтобы ослабить влияние краевых условий на характеристики воспроизводимых потоков. В качестве числа Рейнольдса целесообразно выбрать следующую величину:

$$Re = \frac{U_\infty \Lambda}{\nu}, \quad (5.1.8)$$

где Λ – характерная длина погруженной границы, которая в численных экспериментах соответствует диаметру кругового цилиндра D .

Течение вокруг кругового цилиндра. Такое течение исследовалось при различных значениях числа Рейнольдса во многих работах как с помощью численного моделирования, так и на основе лабораторных физических экспериментов, что делает его подходящим объектом для надежной проверки метода погруженной границы для воспроизведения потока в достаточно сложной области. Данный численный эксперимент также использовался для демонстрации быстродействия реализации на графических процессорах и сравнения с традиционной архитектурой.

Вычисления проводились при числе Рейнольдса $Re = 100$. При малых числах Рейнольдса ($Re < Re_{cr}$, $Re_{cr} \approx 47$) рассматриваемое течение является стационарным. При этом за круговым цилиндром образуются два симметричных вихря, продольный размер которых зависит от числа Рейнольдса. При увеличении $Re > Re_{cr}$ течение становится нестационарным и периодическим, а за цилиндром образуется дорожка Кармана.

Для сравнения метода погруженной границы с другими подходами рассчитывались значения коэффициентов лобового сопротивления (3.4.16), коэффициента подъемной силы (3.4.17) и число Струхала St , соответствующее безразмерной величине частоты периодического течения:

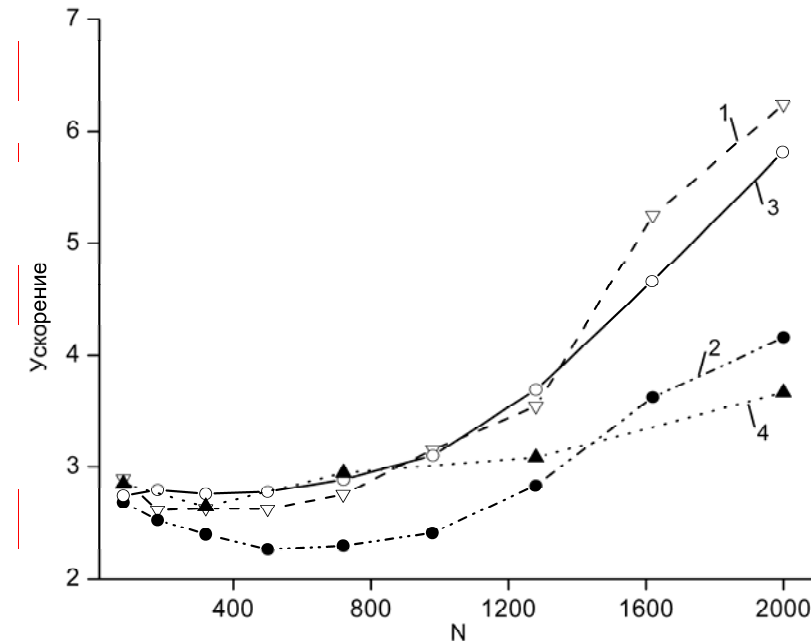
$$St = \frac{f_q}{U_\infty D}, \quad (5.1.9)$$

где f_q – частота переменного вихря. В статье (Williamson, 1989) предлагается следующая эмпирическая зависимость частоты Струхала от числа Рейнольдса при $Re < Re_0$, $Re_0 \approx 180$, основанная на экспериментальных данных:

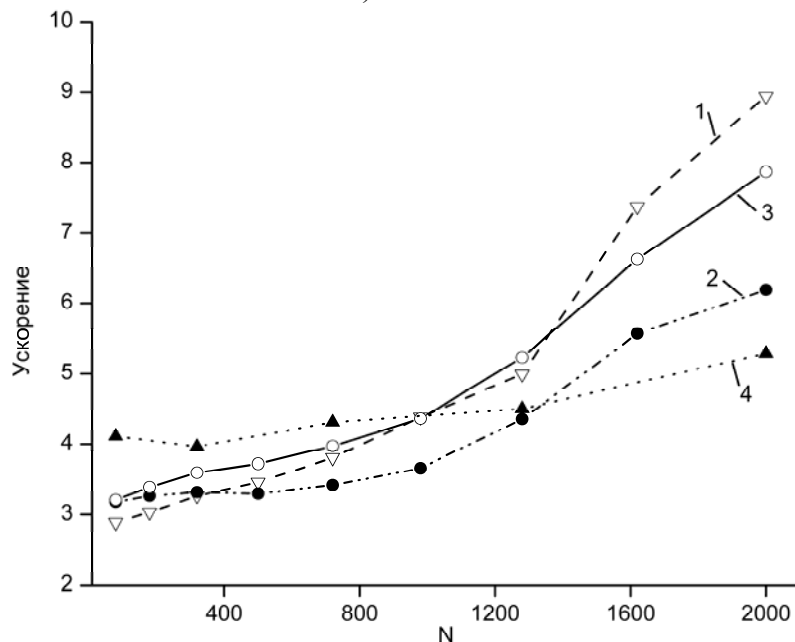
$$St = 0.00016 Re + 0.1816 - 3.3265 Re^{-1}. \quad (5.1.10)$$

Вычисления проводились на равномерной прямоугольной сетке в области $40D \times 20D$, а центр кругового цилиндра был расположен в точке $(10D, 10D)$. В таблице 5.1.1 приведены значения коэффициентов лобового сопротивления, подъемной силы и числа Струхала, полученные на графическом процессоре с одинарной точностью и шагом сетки $0.025D$, в сравнении с C_D и C_L , полученными в других работах, и соответствующими значениями числа Струхала, рассчитанными на основе зависимости (5.1.10). При решении аналогичной задачи на центральном процессоре отклонения от полученных значений

незначительны, а при использовании двойной точности наблюдается небольшое уменьшение значения коэффициента подъемной силы и числа Струхала. Для определения частоты f_q в (5.1.9) использовалось преобразование Фурье для ряда значений C_L по времени. Основная доля вычислений при численном воспроизведении течения вокруг кругового цилиндра приходится на решение уравнения Пуассона. При решении системы (3.4.4) с использованием многосеточного метода в качестве предобусловливателя доля вычислений, связанных с операциями метода погруженной границы, составляет несколько процентов.



а) Nvidia Tesla T10



б) Nvidia Tesla T20

Рис. 5.1.1. Ускорение вычислений на графическом процессоре в зависимости от типа предобусловливателя: 1 – предобусловливатель Якоби (5.1.2); 2 – симметричный метод Гаусса-Зейделя (5.1.3) с переупорядочиванием узлов; 3 – предобусловливатель (5.1.4); 4 – геометрический многосеточный метод с V-циклом.

Табл. 5.1.1. Значения коэффициентов лобового сопротивления C_D (среднее) и подъемной силы C_L (* – среднее квадратичное), числа Струхала St для течения вокруг кругового цилиндра при числе $Re = 100$.

	C_D	C_L	St
Williamson, 1989	-	-	0.164
Braza et al., 1986	1.36 ± 0.015	± 0.25	-
Liu et al., 1998	1.35 ± 0.012	± 0.339	0.164
Tseng and Ferziger, 2003	1.42	0.29^*	0.164
Lai and Peskin, 2000	1.4473	0.3299^*	0.165
Herfjord, 1996	1.36	± 0.34	0.168
Berthelsen P.A. and Faltinsen, 2008	1.38 ± 0.01	± 0.34	0.169
Мортиков, 2012	1.405 ± 0.0072	± 0.348	0.168

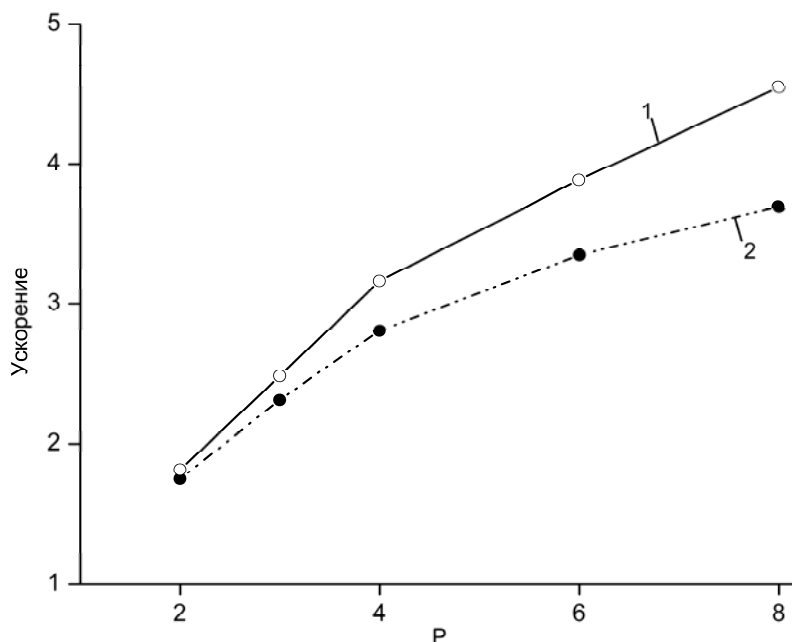
На рис. 5.1.1 показано ускорение вычислений на ГПУ (а – Nvidia Tesla T10, б – Nvidia Tesla T20) относительно четырех ядер центрального процессора Intel Xeon E5472 3.0Hz в зависимости от типа предобусловливателя в методе сопряженных градиентов. Приняты следующие обозначения: линия 1 – предобусловливатель Якоби (5.1.2); линия 2 – симметричный метод Гаусса-Зейделя (5.1.3) с переупорядочиванием узлов; линия 3 – предобусловливатель (5.1.4); линия 4 – геометрический многосеточный метод с V-циклом. Вычисления проводились с одинарной точностью на последовательности сеток с уменьшением шага h . Значение N по горизонтальной оси соответствуют числу точек сетки (в тысячах). Отношение шага сетки h к шагу по времени и отношение элемента длины кругового цилиндра Δl к h в расчетах полагались постоянными. Ускорение рассчитывалось, как отношение осредненного времени счета на центральном и графическом процессоре для одного шага интегрирования полной системы за промежуток времени, составляющий один период вихревой дорожки Кармана.

Несмотря на значительное ускорение для предобусловливателя Якоби на графическом процессоре применение других подходов позволяет сократить общее время счета. Для симметричного метода Гаусса-Зейделя время счета уменьшается на 35 процентов для сетки с шагом $h = 0.025D$. Низкое ускорение симметричного метода Гаусса-Зейделя с переупорядочиванием узлов на графических процессорах связано с увеличением числа точек синхронизации и необходимостью в выполнении медленных операций чтения/записи глобальной памяти для двух наборов из чередующихся точек сетки в операциях матрично-векторного умножения. Существенного снижения производительности можно ожидать в том случае, если для параллельной реализации симметричного метода Гаусса-Зейделя требуется многоцветное упорядочивание узлов сетки.

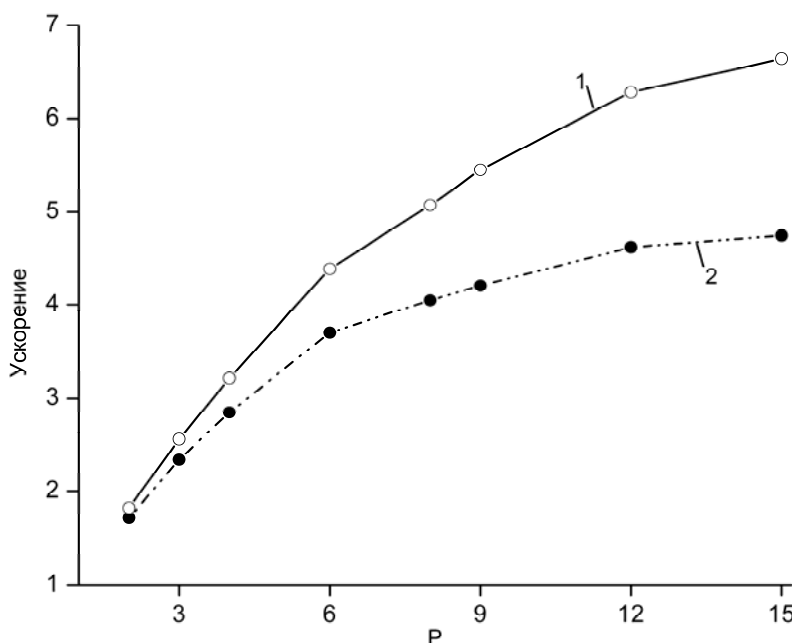
Для предобусловливателя (5.1.4) и модификации метода сопряженных градиентов (Demmel et al., 1993) наблюдается аналогичное сокращение времени счета относительно предобусловливателя Якоби. Тем не менее для трехмерных задач и при использовании схем более высокого порядка по пространству можно ожидать, что матрица предобусловливателя (5.1.4) будет хуже аппроксимировать обратную матрицу системы уравнений, что может привести к падению результатов по сравнению с другими предобусловливателями (Dongarra et al., 1998).

В приводимых расчетах для многосеточного метода (рис. 5.1.1, линия 4) число сеток последовательно увеличивается так, что число точек на самой грубой сетке остается приблизительно постоянным при масштабировании задачи. При этом решение системы на наиболее грубых сетках в силу малого числа точек эффективнее проводить на центральном процессоре. Быстродействие реализации многосеточного метода на графическом процессоре существенно зависит от объема вычислений и, как следствие

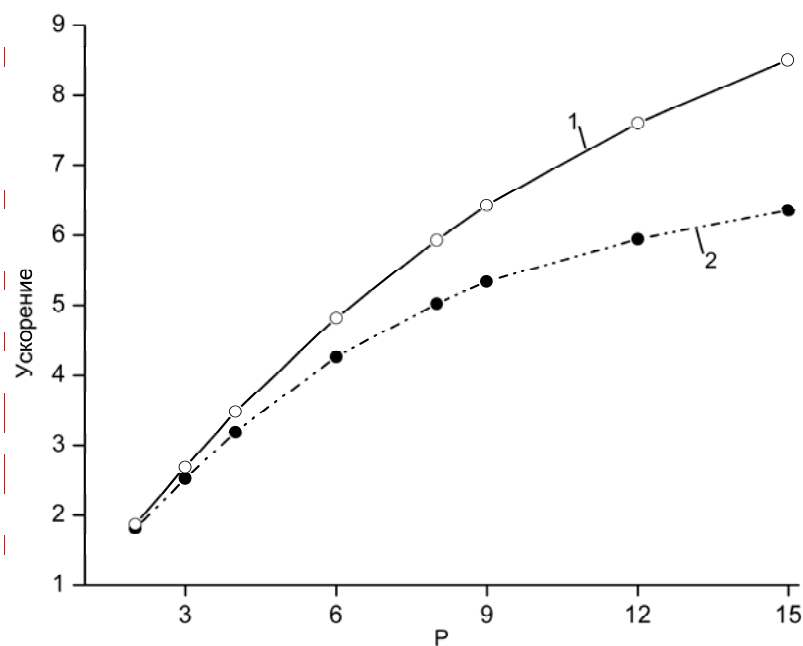
уменьшается при увеличении шага сетки. Данный эффект будет более существенным при реализации многосеточного метода с W или F циклом (Ольшанский, 2003). Следует заметить, что в работе (Мортиков, 2012) использовались достаточно простые операторы проектирования и продолжения. Применение более сложных и точных вариантов данных операторов должно приводить к увеличению ускорения реализации на графических процессорах относительно традиционной архитектуры.



a) Nvidia Tesla T10, $h = 0.025D$



б) Nvidia Tesla T20, $h = 0.01667D$



в) Nvidia Tesla T20, $h = 0.0125D$

Рис. 5.1.2. Ускорение при распределении вычислений по графическим процессорам с помощью библиотеки MPI: 1 – предобусловливание (5.1.4), 2 – симметричный метод Гаусса-Зейделя (5.1.3) с переупорядочиванием узлов.

На рис. 5.1.2 представлены результаты распределения вычислений по графическим процессорам с помощью библиотеки MPI для предобусловливателя (5.1.4) (линия 1) и симметричного метода Гаусса-Зейделя (5.1.3) с переупорядочиванием узлов сетки (линия 2). Рассматривалась масштабируемость задачи о течении вокруг кругового цилиндра на кластере из 8 процессоров Nvidia Tesla T10 для сетки с шагом $h = 0.025D$ (рис. 5.1.2а) и на суперкомпьютере "ГрафИТ!" (Nvidia Tesla T20) для сеток с шагом $h = 0.01667D$ (рис. 5.1.2б) и $h = 0.0125D$ (рис. 5.1.2в). При реализации предобусловливателя (5.1.4) умножение на матрицу M^{-1} в модификации (Demmel et al., 1998) выполнялось без синхронизации, что в отличие от симметричного метода Гаусса-Зейделя не приводит к существенному увеличению числа итераций в методе сопряженных градиентов. Переупорядочивание узлов сетки для предобусловливателя (5.1.3) вызывает дополнительные трудности при организации обменов данными между графическими процессорами.

Сравнение результатов при декомпозиции расчетной области по одной и двум координатам на вычислительные узлы показало, что в последнем случае наблюдается падение производительности. К основным причинам можно отнести увеличение числа обменов, приходящихся на узел, что приводит к увеличению числа медленных операций копирования графической памяти и отсутствию последовательного доступа к памяти устройства по одной координате.

Течение вокруг группы круговых цилиндров. Увеличение числа погруженных областей и, как следствие, рост числа точек криволинейной границы на заданной сетке может привести к тому, что время решения системы (3.4.14) и операций (3.4.6), (3.4.7) становится соизмеримым со временем, затраченным на решение уравнения Пуассона (3.4.4). Это связано с неравномерным ускорением алгоритма на архитектуре графических процессоров. Декомпозиция области по графическим процессорам с помощью библиотеки MPI также требует выполнения дополнительных обменов данными между процессами при аппроксимации краевых условий на криволинейных границах.

Для оценки быстродействия реализации на графических процессорах метода погруженной границы численно решалась задача о течении вокруг группы из N_b ($N_b = 3, \dots, 18$) круговых цилиндров. В большинстве работ аналогичные задачи решаются с целью анализа эффективности предлагаемых методов и алгоритмов. Например, в статье (Udaykumar et al., 2001) течение вокруг группы круговых цилиндров исследуется для проверки многосеточного метода в области с погруженными границами. В работе (Gao et al., 2007) проводилось моделирование течения вокруг группы из восемнадцати круговых цилиндров, расположенных в шахматном порядке, при числах Рейнольдса, равных 100 и 200. Из численных расчетов, представленных в этой работе, следует, что течение сохраняет стационарность при $Re = 100$ и становится нестационарным при $Re = 200$.

Конфигурация области в рассматриваемой задаче выбиралась в соответствии со статьей (Gao et al., 2007): $45D \times 30D$. Центры круговых цилиндров имеют следующие координаты по x : $x_i = 10D + \frac{3}{2}(i-1)D$, $1 \leq i \leq 7$. Для нечетных значений i координата y центра круговых цилиндров задавалась как $y_{ij} = 12D + 3(j-1)D$, $1 \leq j \leq 3$, а для четных i : $y_{ij} = 13.5D + 3(j-1)D$, $1 \leq j \leq 2$. Вычисления проводились на равномерной прямоугольной сетке с шагом $h = 0.05D$ и $h = 0.025D$.

На рис. 5.1.3 приведено ускорение, полученное на одном графическом процессоре (Nvidia Tesla M2050) относительно вычислений на одном ядре Intel Xeon E5472 3.0Hz для расчетов, связанных с методом погруженной границы (3.4.14), (3.4.15) и оценкой коэффициентов (3.4.16), (3.4.17) при последовательном добавлении столбцов круговых цилиндров на фиксированной сетке с шагом $h = 0.05D$ (рис. 5.1.3а) и $h = 0.025D$ (рис. 5.1.3б). Значения по горизонтальной оси N_b определяет число круговых цилиндров. Результаты соответствуют решению системы (3.4.14) классическим методом сопряженных градиентов (рис. 5.1.3, линия 2) и его модификацией (Chronopoulos and Gear, 1989) (рис. 5.1.3, линия 1). При $N_b = 18$ доля операций (3.4.14) - (3.4.17) от общего времени интегрирования системы на один шаг по времени при использовании многосеточного метода в качестве предобусловливателя в итерационном методе решения уравнения Пуассона составляет приблизительно 20 процентов. Вычисление коэффициента лобового сопротивления и коэффициента подъемной силы на графическом процессоре проводились отдельно для каждой погруженной границы, что при $N_b > 8$, занимает 10 – 20 процентов от всех расчетов (3.4.14) – (3.4.17). Учитывая относительно малое число точек погруженных границ, улучшение результатов при использовании варианта метода сопряженных градиентов (Chronopoulos and Gear, 1989) достигается за счет экономии времени, необходимого для инициализации операции копирования графической памяти.

Для случая $N_b = 18$ проводилась также серия вычислений при числах Рейнольдса в интервале от 100 до 200. Полученные результаты свидетельствуют о том, что течение сохраняет стационарность при числах Рейнольдса $100 \leq Re < 140$ на достаточно долгих временных интервалах ($T \gg T_c$, где T_c – время установления периодического течения при моделировании течения вокруг единичного кругового цилиндра при $Re = 100$). При дальнейшем увеличении времени интегрирования наблюдается рост коэффициента лобового сопротивления и малые устойчивые колебания значений C_D и C_L , что характерно для нестационарного режима. Данное обстоятельство может быть связано с тем, что вычисления проводились на графическом процессоре с одинарной точностью. Более точное определение характеристик течения при $N_b = 18$ и нахождение критического числа Рейнольдса требует дополнительных исследований.

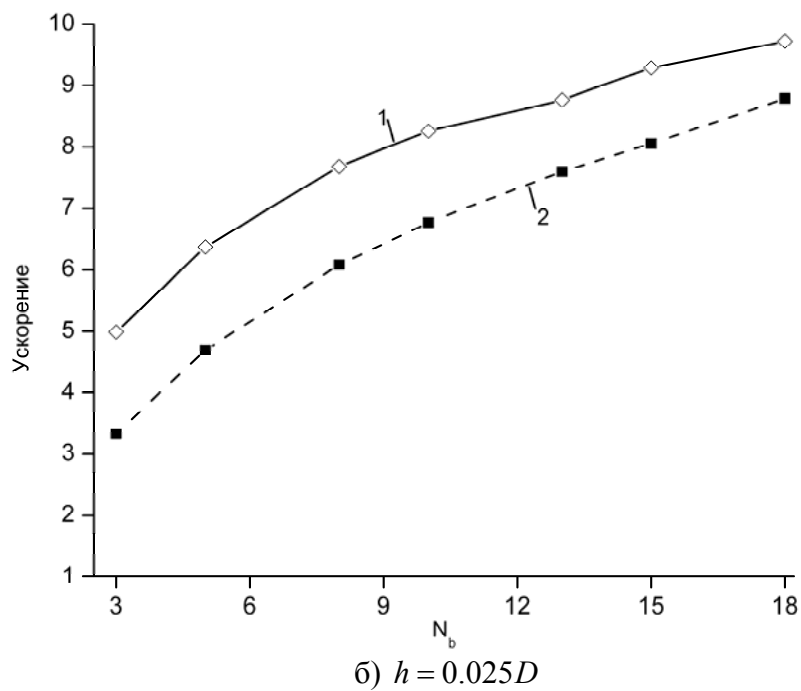
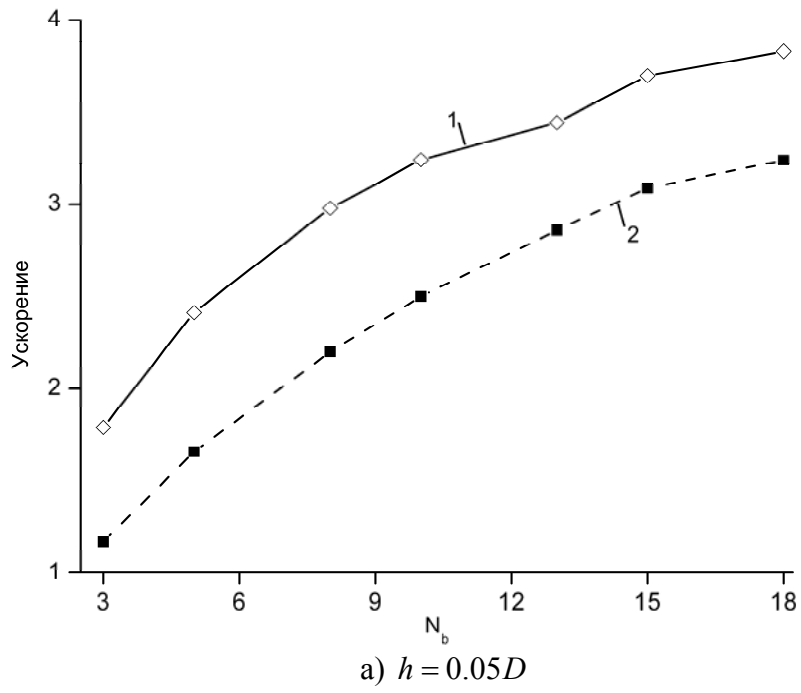


Рис. 5.1.3. Ускорение операций метода погруженной границы на графическом процессоре: 1 – модифицированный метод сопряженных градиентов (Chronopoulos and Gear, 1989), 2 – классический метод сопряженных градиентов.

Течение вокруг подвижного кругового цилиндра. Рассматривается течение вокруг кругового цилиндра, совершающего гармонические колебания в поперечном направлении к потоку по закону:

$$y(t) = A \sin(2\pi f_0 t). \quad (5.1.11)$$

В обсуждаемых ниже расчетах принимались следующие значения параметров: амплитуда $A = 0.2D$, частота $f_0 = 0.8f_s$ и $f_0 = 1.1f_s$, где f_s – частота дорожки Кармана для стационарной задачи при $Re = 185$. Расчеты проводились в области $40D \times 20D$ при шаге сетки $h = 0.025D$. Параметрами, определяющими данное течение, можно считать отношение частот f_0 / f_s и амплитуды колебаний к диаметру цилиндра. При приближении частоты f_0 к частоте f_s наблюдается синхронизация движения цилиндра с вихревой дорожкой, образующейся за цилиндром. Экспериментальные исследования (Bishop and Hassan, 1964) показали, что в этом случае происходит увеличение средних значений коэффициентов лобового сопротивления и коэффициента подъемной силы. Для сил, действующих на цилиндр, наблюдается отклонение в фазе относительно колебаний, заданных соотношением (5.1.11). В работе (Ongroen and Rockwell, 1988) получен следующий диапазон частот, при котором наблюдается эффект синхронизации:

$$0.85 < f_0 / f_s < 1.17. \quad (5.1.12)$$

В табл. 5.1.2 приведены значения для коэффициента лобового сопротивления и коэффициента подъемной силы, полученные при вычислениях на графическом процессоре с одинарной точностью. На рис. 5.1.4 изображены графики C_D и C_L как функции времени для соотношений частот $f_0 = 0.8f_s$ и $f_0 = 1.1f_s$ соответственно.

Табл. 5.1.2. Значения коэффициентов лобового сопротивления (среднее) и подъемной силы (среднее квадратичное) при $Re = 185$, $A = 0.2D$.

	C_D $f_0 = 0.8f_s$	C_L $f_0 = 0.8f_s$	C_D $f_0 = 1.1f_s$	C_L $f_0 = 1.1f_s$
Guilmineau and Queutey, 2002	1.195 ± 0.036	0.08	1.42	0.897
Wu and Shu, 2008	-	-	1.454	0.854
Yang et al., 2009	1.281 ± 0.042	0.076	-	-
Мортиков, 2012	1.24 ± 0.039	0.063	1.457 ± 0.155	0.943

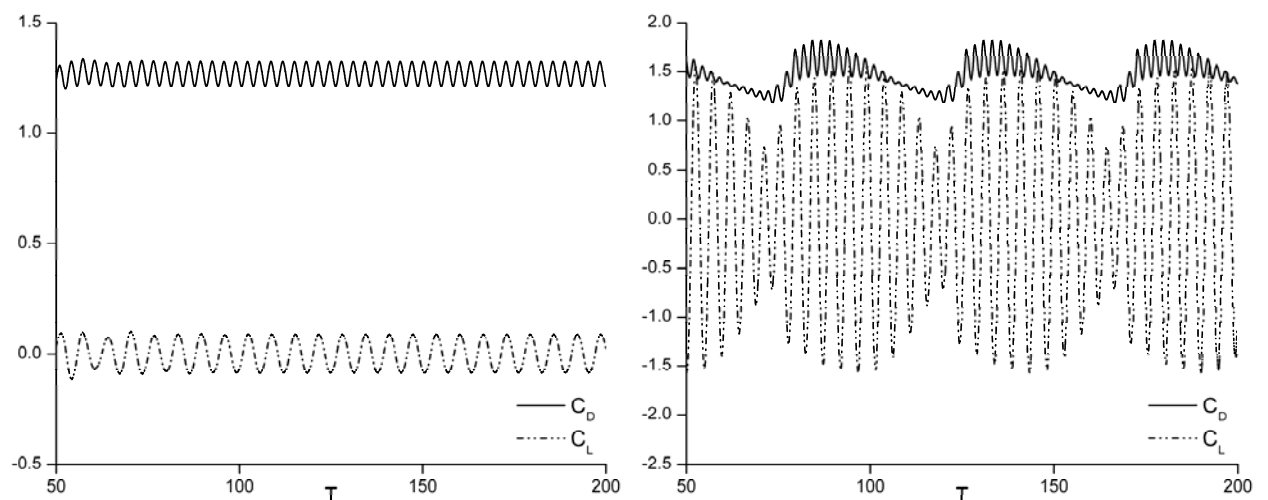


Рис. 5.1.4. Временные ряды значений коэффициента лобового сопротивления и коэффициента подъемной силы при движении кругового цилиндра (5.1.11). На рисунке слева соотношение частот: $f_0 = 0.8f_s$, справа: $f_0 = 1.1f_s$.

Ускорение реализации на графическом процессоре (Nvidia Tesla M2050) относительно одного ядра центрального процессора Intel Xeon E5472 3.0Hz для операций метода погруженной границы (3.4.14) – (3.4.17) и пересчете матрицы системы (3.4.14) при вынужденных осцилляциях кругового цилиндра показано на рис. 5.1.5 (линия 1). Для сравнения приводится ускорение вычислений (3.4.14) – (3.4.17) для неподвижного цилиндра (рис. 5.1.5, линия 2). График построен при увеличении числа точек криволинейной границы и одновременном масштабировании прямоугольной сетки. Число Куранта и отношение Δl к шагу сетки h оставалось при этом постоянным. При моделировании подвижных границ увеличивается доля вычислений, связанных с аппроксимацией краевых условий, что может значительно влиять на общее время численного эксперимента.

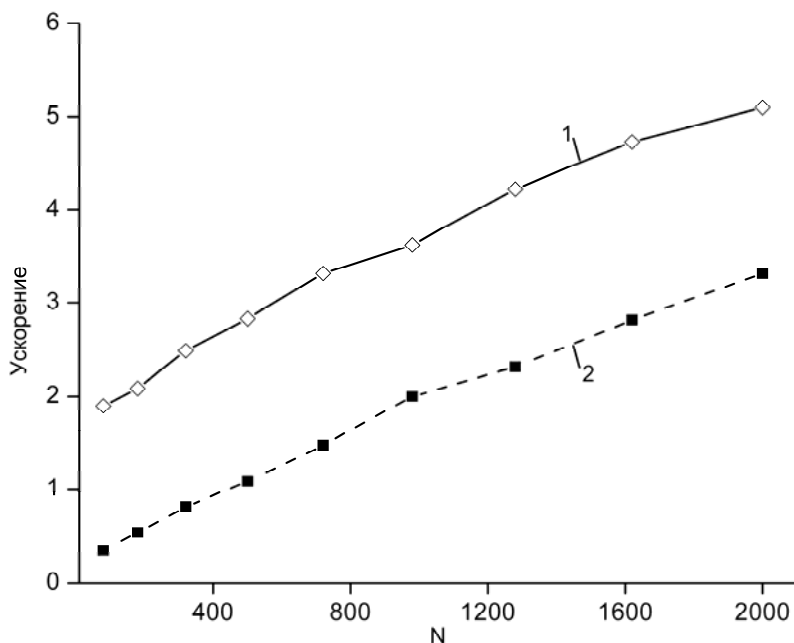


Рис. 5.1.5. Ускорение операций метода погруженной границы на графическом процессоре: 1 – вынужденные колебания кругового цилиндра, 2 – неподвижный цилиндр.

Рост числа точек сетки (с сохранением соотношения $\Delta l/h$) приводит к ожидаемому уменьшению (в силу различия в числе точек границы и точек двумерной сетки) доли вычислений, приходящихся на операции (3.4.14) – (3.4.17), и пересчете матрицы (3.4.14) при смещении границы. Тем не менее, поскольку операторы (3.4.6) и (3.4.7) также зависят от разрешения сетки, то это уменьшение не так значительно. Для рассматриваемой задачи, расчеты, связанные с методом погруженной границы, составили на графическом процессоре от 20 до 35 процентов от общего числа вычислений в зависимости от размерности сетки (для решения уравнения Пуассона в качестве предобусловливателя использовался геометрический многосеточный метод).

Выводы. На примере решения ряда гидродинамических задач показаны основные особенности реализации метода погруженной границы для решения уравнений Навье-Стокса на архитектуре графических процессоров. Результаты расчетов свидетельствуют о возможности эффективного применения этого метода для описания криволинейных границ на прямоугольных сетках и моделирования течений в областях сложной конфигурации на данной архитектуре. При этом удастся добиться ускорения основных частей численного алгоритма – итерационного метода решения эллиптического уравнения и метода погруженной границы. Существенной проблемой при распределении данных на группу графических процессоров являются дополнительные операции копирования памяти устройства, что необходимо учитывать при решении трехмерных задач, где

увеличивается объем пересылаемых данных и число графических карт, необходимых для моделирования течений с достаточным пространственным разрешением. Важной задачей представляется разработка и исследование “быстрых” предобусловливателей для итерационных методов на графических процессорах, в частности для трехмерных эллиптических уравнений. Для некоторых вариантов метода погруженной границы в ряде случаев многосеточные методы менее эффективны, а использование простейших предобусловливателей в итерационном методе приводит лишь к незначительным улучшениям. Вопросы, связанные с быстродействием геометрического многосеточного метода для распределенных вычислений с дополнительным параллелизмом за счет графических процессоров, также требуют специальных исследований. Перспективным представляется разработка реализаций на графических процессорах моделей численного воспроизведения турбулентных течений, таких как методы вихреразрешающего моделирования (Sagaut, 2006), в которых, как правило, значительная доля вычислений приходится на операции, связанные с замыканием системы уравнений. Интересный пример такого подхода в приложении к моделированию турбулентных облаков представляет собой статья (Schalkwijk et al., 2011).

5.2. Вихреразрешающее моделирование геофизических пограничных слоев

Вихреразрешающие нестационарные негидростатические численные модели (LES-модели) турбулентных течений представляют собой удобный и относительно дешевый (с точки зрения вычислительных затрат) инструмент, позволяющий исследовать широкий спектр движений жидкости при различных условиях. В геофизической гидродинамике такие модели обычно применяются для исследования мелкомасштабной турбулентности и квазиупорядоченных крупномасштабных структур в пограничных слоях атмосферы и океана. Однако, основываясь на результатах численных экспериментов с этими моделями можно сделать некоторые обобщающие выводы, касающиеся общей природы трехмерной (бароклинной) и двумерной (баротропной) компонент турбулентного течения, а также их взаимодействия между собой (Glazunov et al., 2010).

Для корректного воспроизведения динамики турбулентных потоков требуется высокое пространственное разрешение. Например, для расчетов нестационарных турбулентных течений между зданиями городской застройки необходимы шаги сетки размером порядка 1 метра. При моделировании поля ветра между зданиями и динамики пограничного слоя атмосферы над ними (на несколько часов модельного времени в расчетной области $1 \times 1 \times 0.4 \text{ км}^3$) требуется решать задачу с размерностью сеточной области 5×10^8 узлов и количеством шагов по времени в несколько десятков тысяч. Такие расчеты могут быть выполнены только с применением современных параллельных вычислительных систем с большим количеством расчетных модулей.

В публикациях (Глазунов, 2009а, 2009б) представлена нестационарная трехмерная гидродинамическая модель, предназначенная для численного расчета динамики развитых турбулентных потоков жидкости в областях сложной конфигурации. Она основана на использовании консервативных численных схем высокого порядка точности и локализованного смешанного динамического замыкания, параметризующего влияние мелкомасштабных «подсеточных/подфильтровых» пульсаций скорости на динамику относительно крупных вихрей, воспроизводящихся в модели явно (см. раздел 1.6). Предполагается, что данную модель можно применить для расчетов: 1) обтекания групп зданий и одиночных зданий; 2) переноса безынерционных и малоинерционных пассивных примесей над топографически неоднородной поверхностью, соответствующей условиям городской застройки; 3) турбулентных подледных течений в океане с целью определения гидродинамического сопротивления подводной поверхности льда в Арктике, характеризующейся наличием крупных топографических особенностей, сравнимых по размерам с толщиной перемешанного слоя (подледные торосы и трещины).

Краткое описание модели. В качестве прогностических переменных модели используются фильтрованные компоненты скорости u_i , уравнения эволюции которых в приближении Буссинеска можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \delta_{i3} \alpha \left(\bar{\theta} - \langle \bar{\theta} \rangle_{x_1 x_2} \right), \quad (5.2.1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (5.2.2)$$

Здесь $\langle \theta \rangle_{x_1 x_2}$ – среднее по горизонтальной плоскости значение потенциальной температуры θ , $\alpha = g / \theta_0$ – параметр плавучести (в расчетах, представленных ниже, $\alpha = 1/30$ м/с²К), θ_0 – характерное значение θ . Черта над переменными означает пространственную фильтрацию, подавляющую преимущественно мелкомасштабные компоненты флуктуаций: $\bar{u}_i \equiv F u_i$, $\bar{\theta} \equiv F \theta$, где F – заданный линейный, симметричный, положительно определенный оператор. Полагается, что оператор F коммутирует с операторами дифференцирования по пространству и времени. В пространстве волновых чисел оператор фильтрации имеет вид: $F \phi(\vec{k}) = f(|\vec{k}|) \times \phi(\vec{k})$, где $\vec{k}$ – волновой вектор, ϕ – любая из рассматриваемых прогностических переменных, $f(|\vec{k}|)$ – монотонно убывающая функция и $f(0) = 1$. Следует заметить, что при этом $\bar{\bar{\phi}} \neq \bar{\phi}$. Силами молекулярной вязкости, непосредственно воздействующими на $\bar{u}_i$, пренебрегается в силу их малости при больших числах Рейнольдса.

Фильтрованные нелинейные члены в уравнении переноса импульса (5.2.1) могут быть представлены в виде:

$$\frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (5.2.3)$$

где тензор "подсеточных/подфильтровых" турбулентных напряжений τ_{ij} состоит из трех слагаемых, отвечающих за "крупно-крупно-", "крупно-мелко-" и "мелко-мелко-" масштабные взаимодействия:

$$\tau_{ij} = L_{ij}^g + C_{ij}^g + R_{ij}^g. \quad (5.2.4)$$

Определив "подсеточные/подфильтровые" флуктуации скорости как $u'_i = u_i - \bar{u}_i$, каждое из слагаемых в правой части соотношения (5.2.4) можно выразить (Germano, 1992) через обобщенные вторые моменты $\tau^g(\phi, \psi) = \overline{\phi \psi} - \bar{\phi} \bar{\psi}$:

$$\begin{aligned} L_{ij}^g &= \tau^g(\bar{u}_i, \bar{u}_j), \\ C_{ij}^g &= \tau^g(\bar{u}_i, u'_j) + \tau^g(\bar{u}_j, u'_i), \\ R_{ij}^g &= \tau^g(u'_i, u'_j). \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

Все члены в уравнении переноса импульса (5.2.1), содержащие только фильтрованные переменные $\bar{u}_i$ (первый член в правой части формулы (5.2.3) и $\partial L_{ij}^g / \partial x_j$) вычисляются

явно, а сумма сил от кросс-корреляций и "подфильтровых" напряжений Рейнольдса $C_{ij}^g + R_{ij}^g$, аппроксимируется квазилинейной диссипативной моделью:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (C_{ij}^g + R_{ij}^g) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (2K_u \bar{S}_{ij}), \quad (5.2.6)$$

где $\bar{S}_{ij}$ – тензор деформаций, вычисленный по фильтрованным компонентам скорости, $K_u(\bar{u}(x, t))$ – коэффициент "турбулентной вязкости", определяемый динамически (Germano et al., 1991, Ghosal et al., 1995) и обеспечивающий равновесное состояние коротковолнового участка спектра. Таким образом, существенная часть нелинейных взаимодействий в области больших (но все еще представимых на сетке модели) волновых чисел, заменяется диссипативным слагаемым, что оправдано в случае преобладания прямого каскада энергии в трехмерном турбулентном потоке.

Для определения пространственно-временного распределения коэффициента турбулентной вязкости применяется локализованная динамическая процедура, основанная на поиске минимума функционала ошибок тождества Германо. Для решения данной задачи используется предобусловленный проекционно-градиентный метод с автоматическим выбором шага. Динамическое турбулентное замыкание автоматически регулирует сток кинетической энергии вихрей малого масштаба, так что данная модель не только воспроизводит структуру и энергию крупномасштабных составляющих турбулентного течения, но и позволяет оценить спектральную плотность энергии пульсаций скорости в области больших волновых чисел.

Данный подход используется с целью уменьшения ошибок аппроксимации нелинейных слагаемых конечно-разностной схемой. Результатом интегрирования такой численной модели являются сглаженные поля скорости $\bar{u}_i$. Поскольку $f(|\vec{k}|)$ – гладкая, медленно убывающая с ростом $|\vec{k}|$ функция, то существенная часть спектра энергии пульсаций $E_{\bar{u}}(\vec{k})$ оказывается заниженной по сравнению со спектральной плотностью распределения энергии пульсаций реального турбулентного потока при тех же внешних условиях. Необходимо отметить одну особенность использованной LES-модели, важную при последующем анализе результатов расчетов: обратимость оператора фильтрации F позволяет в любой момент времени получить из прогностической переменной $\bar{u}$ "реконструированную" скорость $\bar{u}^* = F^{-1}\bar{u}$, более точно отражающую мелкомасштабную структуру течения (см. Glazunov, 2009б).

Для моделирования термической конвекции представленная выше модель дополнена уравнением переноса-диффузии скаляра (фильтрованной потенциальной температуры) $\bar{\theta}$:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{u}_i \bar{\theta}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} K_{\theta} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}, \quad (5.2.7)$$

в котором коэффициент "подсеточной" теплопроводности K_{θ} полагался пропорциональным коэффициенту "подсеточной" вязкости K_u с фиксированным числом Прандтля $Pr = K_u / K_{\theta}$.

Интегрирование модели осуществляется с использованием конечно-разностного метода. Для аппроксимации членов уравнений (5.2.1) по пространству применена смещенная сетка C . При этом компоненты вектора скорости вычисляются на сторонах

сеточного объема, а значения модифицированного давления $\bar{p}^* = \bar{p} + 1/3\tau_{ii}$ и других скалярных величин приписываются центру сеточной ячейки. В настоящее время общепризнанным является тот факт, что использование численных схем высокого порядка точности может существенно улучшить результаты моделирования турбулентных потоков. В первую очередь это связано с тем, что в ряде случаев, ошибки аппроксимации схем низкого порядка могут существенно превосходить величину членов, обусловленных наличием мелкомасштабной турбулентности во всем диапазоне волновых чисел, воспроизводимых моделью (см. например, Ghosal, 1996). Существенную роль при моделировании турбулентных потоков также играет консервативность используемых численных схем. В рассматриваемой модели реализована схема четвертого порядка точности на смещенной сетке, записанная в кососимметричной форме (Morinishi et al., 1998).

В зависимости от граничных условий и формы расчетной области уравнение Пуассона может решаться либо прямым методом Фурье, либо итерационно. В первом случае используется двумерное быстрое преобразование Фурье в плоскостях $x_3 = \text{const}$. В пространстве собственных функций конечноразностного оператора, аппроксимирующего двумерный оператор Лапласа с четвертым порядком точности, система уравнений распадается на $N_x \times N_y$ независимых систем линейных уравнений с семи-диагональными матрицами, каждая из которых решается методом Гаусса. Затем выполняется обратное преобразование Фурье.

Итерационный алгоритм основан на методе сопряженных градиентов, а в качестве предобусловливателя используются несколько шагов SSOR (симметричной верхней релаксации) с красно-черным переупорядочиванием точек расчетной области. Для сохранения консервативности численной схемы четвертого порядка применяется 19-точечная аппроксимация оператора Лапласа. При этом оператор перехода в методе SSOR строится исходя из обычной 7-ми точечной аппроксимации, что позволяет значительно сократить количество операций при той же скорости сходимости. Так на размерности задачи $\sim 9 \cdot 10^6$ требуется сделать $\sim 20 - 30$ итераций метода на каждом временном шаге модели, чтобы уменьшить первоначальную невязку системы (для начального приближения, взятого с предыдущего шага по времени) в 10^6 раз. Для интегрирования по времени применяется явная схема Адамса-Бэшфорта, обеспечивающая второй порядок аппроксимации.

Параллельная реализация. Все численные алгоритмы представленной модели распараллелены на основе стандарта MPI и с использованием метода декомпозиции расчетной области, согласно которому каждому вычислительному узлу ставится в соответствие конкретная подобласть. Полнота данных, используемых в шаблонах численных схем, обеспечивается при помощи обменов граничными значениями с узлами, обрабатывающими соседние подобласти. Использование процедуры декомпозиции позволяет достичь хорошей масштабируемости при различных размерах расчетной области и на большом количестве процессоров. Такой подход был выбран в силу своей универсальности и применимости на параллельных вычислительных системах как с общей, так и с распределенной памятью. На каждом модельном шаге процессы обмениваются между собой только данными, относящимися к граничным узлам подобластей декомпозиции. В зависимости от используемой аппроксимации по пространству, возникает необходимость передачи данных, сдвинутых на один или два узла сетки от границы расчетной подобласти. Большинство обменов между процессами реализовано на основе неблокирующих функций приема-передачи. Оперативная память, необходимая для хранения прогностических переменных модели, распределяется между процессами, что снимает ограничения по памяти (при использовании компьютеров с распределенной памятью и при достаточном количестве расчетных модулей). Возможна двумерная или трехмерная декомпозиция расчетной области.

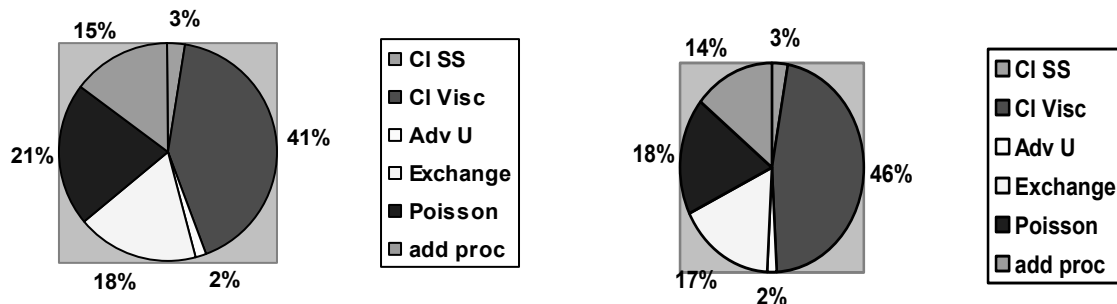


Рис. 5.2.1. Распределение вычислительных затрат в вихреразрешающей модели при размере сеточной области $456 \times 264 \times 76$ (9 149 184) точек, трехмерном разбиении $12 \times 6 \times 2$ (144) процессора (слева) и при размере сеточной области $288 \times 144 \times 72$ (2 985 984), разбиении $6 \times 6 \times 2$ (72) процессора (справа).

Отладка и тестирование параллельной версии модели производилась на суперкомпьютере МВС1000-М и параллельном кластере на базе процессоров Intel-Itanium 2 Института вычислительной математики РАН. На диаграмме 5.2.1 представлено распределение вычислительных затрат в модели. Видно, что около половины расчетного времени тратится на динамическое замыкание (CI Visc), примерно 20 процентов времени занимает решение уравнения Пуассона, около 15-ти процентов приходится на дополнительные процедуры (add proc), включающие статистическую обработку и вывод результатов моделирования. Межпроцессорные обмены занимают 17-18 процентов времени. Основная часть обменов происходит при вызове фильтрации, так как это достаточно “дешевая”, но часто вызываемая процедура в модели. При увеличении размерности модели доля времени, затрачиваемая на решение уравнения Пуассона, растет, что связано с более медленной сходимостью итерационной процедуры. На расчет одного полного цикла в динамической модели с размерностью $288 \times 144 \times 72$ узлов сетки затрачивается приблизительно 20 минут компьютерного времени на 72-х процессорах, а в модели с размерностью $456 \times 264 \times 76$ узлов требуется 43 минуты на 144-х процессорах. Модели со стандартными нединамическими замыканиями считаются приблизительно в 2-2,5 раза быстрее, чем динамические.

В 2008 году модель была перенесена на суперкомпьютер СКИФ-МГУ «Чебышев» (5000 процессоров Intel Xeon E5472 3.0 ГГц). Особое внимание было уделено исследованию эффективности параллельной реализации модели при использовании большого количества расчетных модулей. На примере решения задачи с размерностью около 20 миллионов расчетных узлов сетки установлено, что с увеличением количества используемых процессоров суммарное время выполнения задачи (время расчета, умноженное на число процессоров) уменьшается за счет более эффективного использования кэш-памяти. Так при использовании 304 процессоров суммарное время расчета уменьшается приблизительно в 1.7 раза по сравнению с расчетом на 38 процессорах, а физическое время счета уменьшается в 13.8 раза (при линейной масштабируемости параллельных вычислений ускорение было бы равно восьми).

На рис. 5.2.2 приведен график, демонстрирующий распределение компьютерных затрат между вычислениями и межпроцессорными обменами при использовании 24, 38, 114, 144, 228 и 304-х процессоров. Следует заметить, что в силу большой размерности расчетной области и большого количества дополнительных массивов, необходимых для вычисления «подсеточного/подфильтрового» форсинга, данная задача вообще не может быть реализована в однопроцессорном режиме в силу нехватки оперативной памяти на одном узле. Как видно из рисунка, несмотря на то, что как процент времени на обмены, так и само суммарное время обменов растут с увеличением количества задействованных

процессоров, эффективность использования параллельной вычислительной системы повышается в силу ускорения вычислений при меньших размерностях массивов. В настоящее время модель эксплуатируется на суперкомпьютере «Ломоносов».

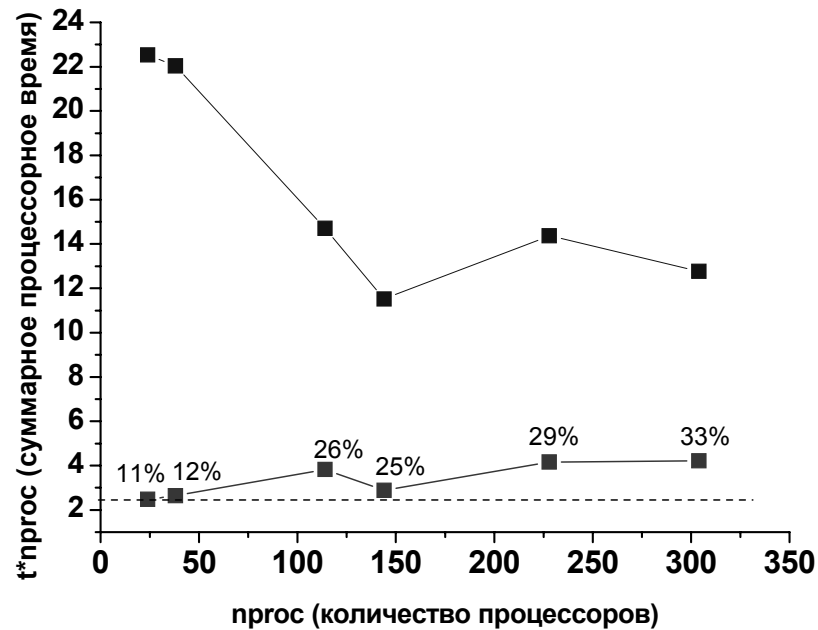


Рис. 5.2.2. Суммарное процессорное время (верхняя линия) и суммарное время, затраченное на обмены (нижняя линия). В расчетах использовались 24, 38, 114, 144, 228 и 304 процессора на суперкомпьютере СКИФ-МГУ «Чебышев» (НИВЦ МГУ).

Численные тесты в целях моделирования обтекания городской застройки.

Турбулентные вихри в пограничном слое атмосферы играют важную роль в ряде задач, например, при моделировании обтекания городской застройки. Расположенные определенным способом высотные здания могут существенно усилить ветровые потоки, перераспределять их, приводить к увеличению порывистости ветра и изменчивости его направления. Целесообразно выполнить ряд численных тестов, посвященных исследованию пригодности описанной выше вихреразрешающей модели для моделирования процессов, связанных с турбулентным обтеканием городской застройки.

На рис. 5.2.3 приведено схематическое изображение модельной расчетной области, использованной в одном из таких тестов, посвященном обтеканию прямоугольного цилиндра. Эта геометрия близко соответствует проведенным в работе (Lyn et al., 1995) измерениям. На левой границе расчетной области задавался постоянный поток со скоростью U_0 . На правой границе использовались конвективные граничные условия. На верхней и нижней границе области применялись условия свободного скольжения. На стенках цилиндра предполагалось, что в пределах первого расчетного слоя профиль скорости можно приблизить логарифмическим законом для гладкой стенки с параметром шероховатости $z_0 = \alpha \nu / u_*$, где u_* – скорость трения.

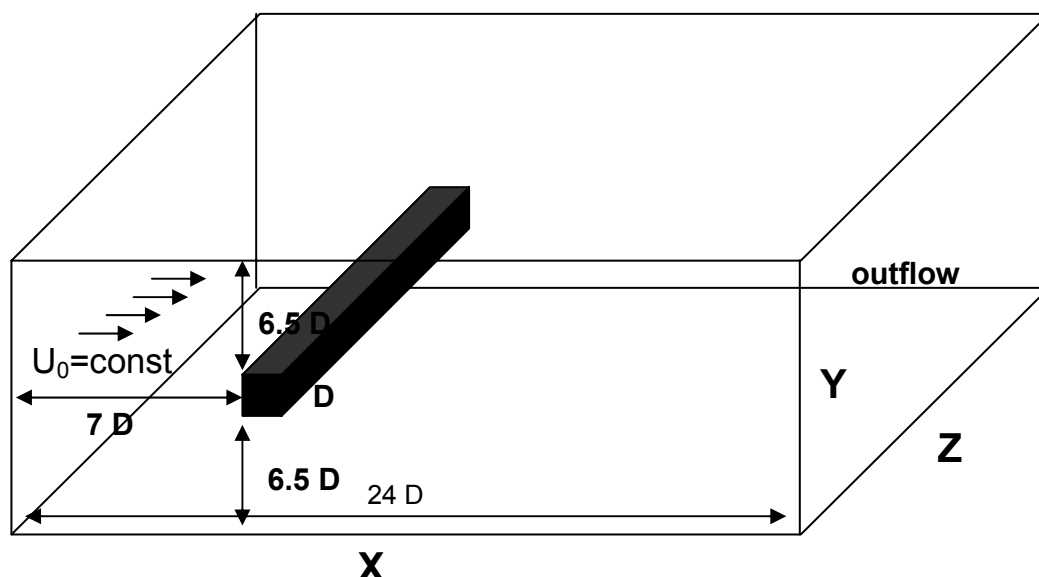


Рис. 5.2.3. Схематическое изображение расчетной области.

Набегающий поток формирует периодическую вихревую дорожку Кармана за цилиндром. Похожая ситуация может возникать при обтекании одиночных высотных зданий. Из рис. 5.2.4, на котором изображена нормированная компонента завихренности $(\partial v / \partial x - \partial u / \partial y) D / U_0$, параллельная оси цилиндра, легко видеть, что по мере удаления от препятствия крупные вихревые структуры разрушаются, образуя более мелкие вихри.

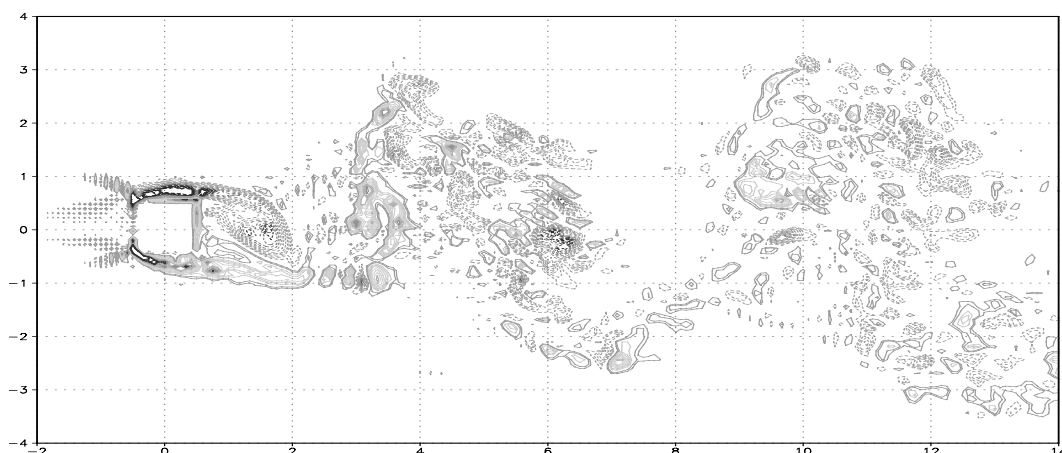


Рис 5.2.4. Параллельная оси цилиндра нормированная компонента завихренности.

Была проведена серия численных экспериментов как с различными подсеточными моделями, так и пространственными разрешениями, в частности, соответствующими 11-ти и 19-ти точкам сетки на сторону цилиндра в направлениях, перпендикулярных его оси. Шаг сетки выбирался равномерным и равным по всем трем пространственным направлениям. В экспериментах с 11-ю точками на сторону цилиндра сеточный размер области был равен $288 \times 144 \times 72$ (2 985 984) узлов, а в экспериментах с 19-ю точками на сторону — $456 \times 264 \times 76$ (9 149 184) точек расчетной области. Расчеты проводились на время $t^+ = t U_0 / D \approx 100$, что соответствует приблизительно 15-ти полным циклам основного колебания, определяемого периодически отделяемыми крупными двумерными вихрями. Предварительно, в каждом численном эксперименте модель интегрировалась до появления квазипериодического режима и установления статистически стационарного

состояния, что потребовало дополнительных расчетов на время $t^+ \sim 50 - 70$, в зависимости от эксперимента.

Рассматриваемые далее тесты были выбраны таким образом, чтобы охватить характерные ситуации, возникающие при обтекании городской застройки, и, вместе с тем, провести сравнение с надежными данными лабораторных измерений и результатами моделирования других авторов. На схематическом рис. 5.2.5 представлена геометрия расчетной области и приведены изоповерхности характеристик течения, полученные в расчетах с моделью и демонстрирующие турбулентный характер движений.

Расчет течения между массивом разнесенных кубов и перемешанного пограничного слоя над ним проводился с целью проверки способности модели воспроизводить динамику пограничного слоя атмосферы над поверхностью с большой явно заданной шероховатостью, характерной для городской застройки (рис. 5.2.5). Моделируется ситуация, характерная для формирования пограничного слоя атмосферы над массивом однотипных зданий городской застройки. Геометрия расчетной области имеет двояко-периодичный характер, что позволяет промоделировать течение, ограничившись относительно небольшой расчетной областью. Данный тест подробно обсуждался в работе (Xie and Castro, 2006), в которой использовались простейшее турбулентное замыкание (стандартная модель Смагоринского) и центрально-разностная схема второго порядка точности. В этой работе был сделан вывод, о том, что данный турбулентный поток сравнительно легко поддается численному моделированию при достаточном пространственном разрешении (16 – 32 точки на сторону куба). Данное свойство потоков этого типа объясняется тем, что инвариантность статистик данного течения, относительно числа Рейнольдса достигается относительно рано (при $Re = UD/\nu \sim 10^3$, где U – скорость набегающего потока, D – длина ребра куба). Кроме того, в данной задаче трение о стенки кубов имеет меньшее влияние на формирование потока, чем сопротивление формы. Данные обстоятельства позволяют успешно промоделировать турбулентное течение между кубами не только при помощи методов LES-моделирования, но и прямым интегрированием уравнений Навье-Стокса на основе DNS-моделирования (см., например, Coceal et al., 2006).

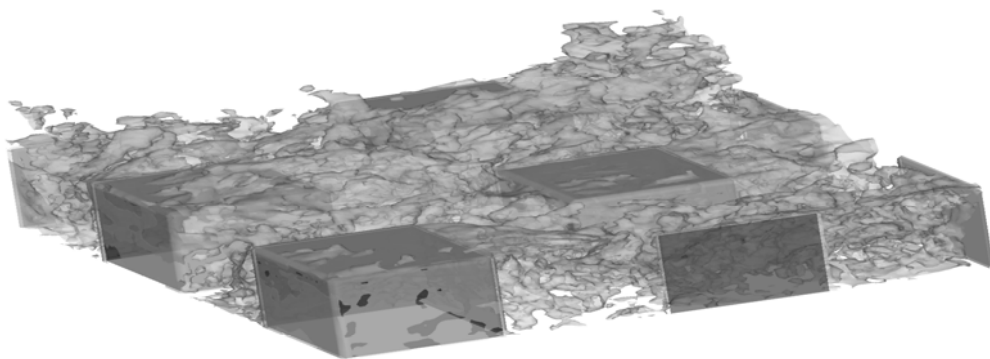


Рис. 5.2.5. Обтекание периодического массива разнесенных кубов, стоящих на поверхности. Приведены изоповерхности модуля скорости течения, взятые из расчета с моделью.

На рис. 5.2.6 приведены профили среднеквадратичного отклонения вертикальной компоненты скорости (нормированные на скорость трения), полученные в расчетах с динамической смешанной моделью, соответствующие 16-ти (светло-серая кривая) и 8-ми (темно-серая кривая) точкам сетки на ребро куба. Для сравнения, на этом же рисунке

приведены профили той же характеристики, полученные в работе (Xie and Castro, 2006, пунктирные кривые). Стрелки указывают соответствие пространственных шагов в обсуждаемых расчетах и расчетах (Xie and Castro, 2006). Сплошной линией изображены результаты прямого численного моделирования (Coceal et al., 2006). Кружками показаны данные лабораторных измерений (Castro et al., 2006). На врезке в правом верхнем углу рисунка показан профиль средней продольной скорости (светло-серая кривая) в сравнении с результатами (Xie and Castro, 2006, Coceal et al., 2006, Castro et al., 2006). На этой же врезке точкой отмечена позиция в горизонтальной плоскости, для которой приведены профили. Можно отметить, что локализованная динамическая смешанная модель (при разрешении 16 точек на объект) воспроизводит характерный максимум изменчивости на высоте $z/h=1$. Таким образом, с помощью предложенной методики удастся достичь заметного улучшения качества результатов моделирования, не прибегая к слишком подробному измельчению шагов сетки.

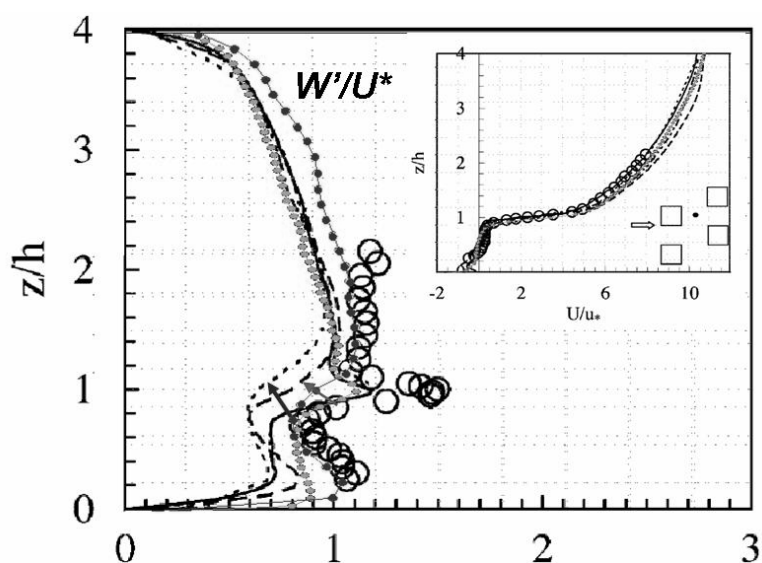


Рис. 5.2.6. Нормированное на скорость трения среднеквадратичное отклонение пульсаций вертикальной компоненты скорости в расчетах с динамической моделью (серые кривые) в сравнении с результатами работы (Castro et al., 2006), данными DNS-расчетов (Coceal et al., 2006) и лабораторных измерений (Castro et al., 2006). Стрелками соединены кривые, полученные в расчетах с одинаковым пространственным разрешением.

Сильный порывистый ветер между зданиями снижает уровень комфорта проживающих в районе людей. Он может причинять вред зеленым насаждениям, приводить к выветриванию почвенного покрова (особенно, в условиях неблагоприятных изменений климата), к повышенной запыленности и к другим вредным для экосистемы последствиям. Части этих последствий можно избежать (или, по крайней мере, ослабить их), если еще на этапе проектирования застройки спрогнозировать наиболее вероятное поведение ветрового потока в предполагаемом районе. Приведенные выше результаты позволяют сделать вывод, что такой прогноз можно осуществить на основе вихреразрешающей модели с пространственным разрешением, позволяющим явно воспроизводить наиболее энергонесущие атмосферные вихри пограничного слоя (рис. 5.2.7).

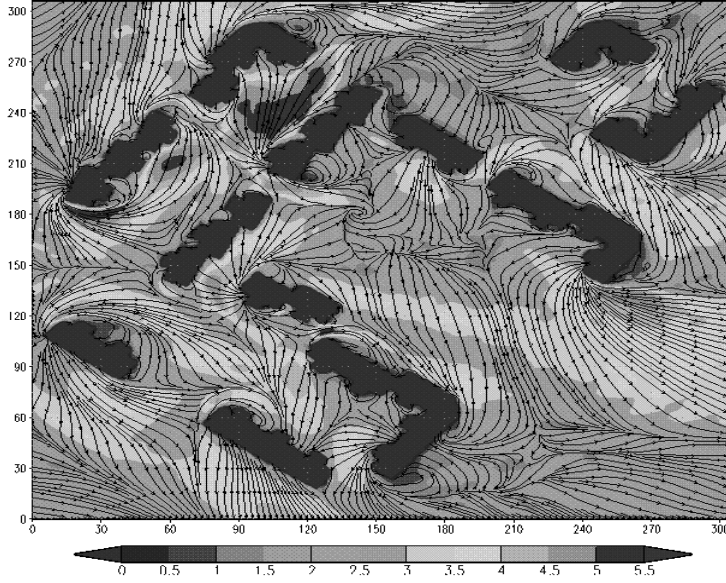


Рис. 5.2.7. Средняя скорость ветра (м/с) при обтекании городской застройки (вид сверху).

Моделирование конвекции Рэля-Бенара. В работе (Glazunov et al., 2010) вихреразрешающая модель была использована для исследования термической конвекции Рэля-Бенара как некоторого аналога многомасштабной атмосферной турбулентности. Подробный обзор работ о физике данного явления можно найти в монографии (Гетлинг, 1999). Расчетная область с декартовой системой координат $x_1x_2x_3$ выбрана так, чтобы отношение ее горизонтального размера к вертикальному обеспечило существование квазидвухмерных крупномасштабных компонент течения ($L_1 : L_2 : L_3 = 25.6 : 25.6 : 1$). В то же время, пространственное разрешение в $1024 \times 1024 \times 40 = 41\,943\,040$ узлов равномерной (с шагом Δx по всем трем направлениям) расчетной сетки дало возможность явно воспроизвести динамику мелкомасштабной трехмерной турбулентной составляющей.

Интегрирование модели производилось в двояко-периодической области ($\phi(x_1 + L_1, x_2 + L_2, x_3) = \phi(x_1, x_2, x_3)$, где ϕ – любая из прогностических переменных модели). На нижней $x_3 = 0$ и верхней $x_3 = L_3$ границах области предполагалось условие непротекания $u_3 = 0$. Турбулентные потоки импульса через нижнюю и верхнюю границы расчетной области вычислялись через соответствующие компоненты тензора "подсеточных/подфильтровых" напряжений

$$\begin{aligned}\tau_{i3}(x_1, x_2, 0) &= -C_D(U\bar{u}_i)_{x_3=\Delta x/2}, \\ \tau_{i3}(x_1, x_2, L_3) &= C_D(U\bar{u}_i)_{x_3=L_3-\Delta x/2},\end{aligned}$$

где $U = \sqrt{\bar{u}_1^2 + \bar{u}_2^2}$, $i = 1, 2$. Это соответствует предположению о локальной логарифмичности профиля скорости течения на масштабе одной ячейки сетки модели: $C_d = \kappa^2 / \ln^2(\Delta x / 2z_0)$, где z_0 – параметр шероховатости, $\kappa = 0.4$ – постоянная Кармана. Кроме того, задавался нагрев на нижней границе и охлаждение на верхней, причем соответствующие потоки тепла приписывались "подсеточному" потоку: $\overline{u'_3\theta'}(x_1, x_2, 0) = \overline{u'_3\theta'}(x_1, x_2, L_3) = H$, $H(x_1, x_2, t) = \text{const}$. Варьируя значение коэффициента сопротивления C_d , можно исследовать процесс турбулентной конвекции при различных соотношениях между генерацией доступной потенциальной энергии, определяемой

потоком тепла на границе области, и диссипацией кинетической энергии течения за счет трения о стенки, имитируя условия протекания конвекции в пограничном слое атмосферы с различными типами подстилающей поверхности.

В качестве начального условия в каждом из экспериментов выбиралось состояние покоя $\bar{u}(\vec{x}, t=0) = 0$. Средняя потенциальная температура задавалась независимой от вертикальной координаты: $\langle \bar{\theta} \rangle_{x_1, x_2}(x_3, t=0) = \text{const}$. Для инициализации гидротермодинамической неустойчивости к постоянному начальному значению $\bar{\theta}(\vec{x}) = \langle \bar{\theta} \rangle_{x_1, x_2}$ на нижнем и верхнем расчетных уровнях модели добавлялся случайный белый шум очень малой амплитуды. Расчеты проводились на срок $\tilde{t} \equiv t/t_* = 55$ (в качестве характерного времени t_* был использован временной масштаб, определяемый потоком плавучести и вертикальным размером области: $t_* = L_3 / w_* = \sqrt[3]{L_3^2 / \alpha H}$).

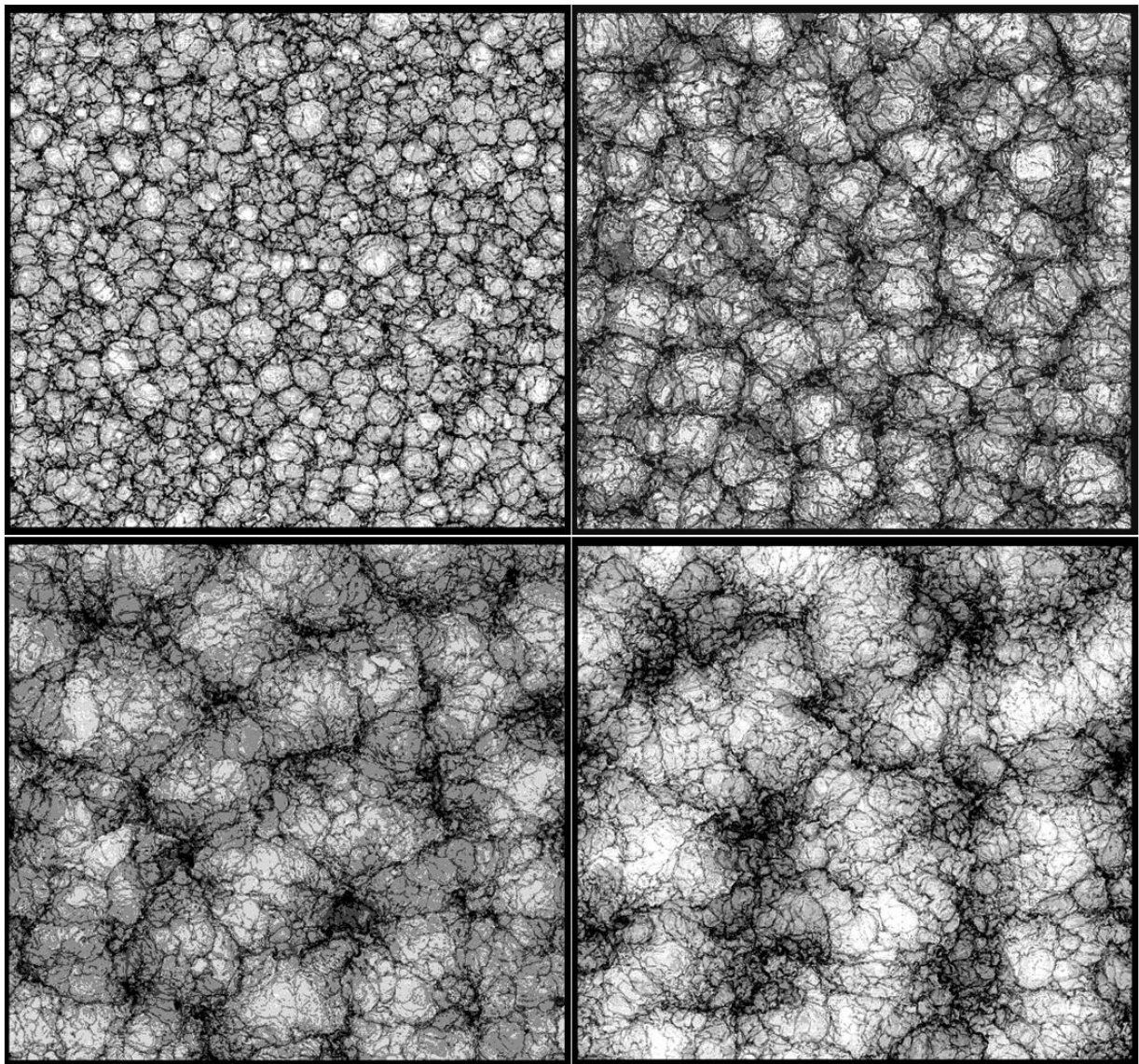


Рис. 5.2.8. Поля аномалий температуры на высоте $L_3/8$, рассчитанные в эксперименте без трения в моменты времени $\tilde{t} = 3, 10, 30$ и 50 (слева направо и сверху вниз, соответственно).

Строго говоря, моделируемая ситуация может и не воспроизводить напрямую процессы, происходящие в реальной атмосфере. Тем не менее, качественные особенности поведения рассматриваемой системы могут оказаться общими как для динамики пограничного слоя атмосферы, так и для более крупномасштабных атмосферных течений, в которых присутствуют баротропная и бароклинная составляющие.

Анализ результатов численных экспериментов показал, что конвекция начинается с мелкомасштабных, хаотически расположенных, всплывающих и опускающихся термиков, которые, объединяясь, образуют конвективные ячейки неправильной формы (в том числе, и деформированные шестиугольные ячейки) примерно одинакового размера, сравнимого с расстоянием между стенками. Затем ячейки начинают сливаться между собой и укрупняться до тех пор, пока размер самых больших аномалий не достигает горизонтального размера расчетной области модели. В каждый момент времени на фоне крупных ячеек наблюдаются мелкомасштабные аномалии. В качестве примера, на рис. 5.2.8 изображена эволюция горизонтального поля аномалий температуры на высоте $L_3/8$, рассчитанная по данным эксперимента без трения ($C_D = 0$) в моменты времени $\tilde{t} = 3, 10, 30$ и 50 .

Кинетическая энергия в системе растет примерно до момента времени $\tilde{t} = 12$ и далее практически не меняется. В экспериментах с трением ($C_D \neq 0$) полная кинетическая энергия уменьшается по сравнению с экспериментом без трения. Дисперсия потенциальной температуры $\left\langle \left(\bar{\theta} - \langle \bar{\theta} \rangle_{x_1 x_2} \right)^2 \right\rangle_{x_1 x_2}$ продолжает расти в течение всего времени, увеличиваясь еще приблизительно на 50-60 % к концу экспериментов по сравнению с моментом достижения квазистационарного состояния для кинетической энергии $\tilde{t} = 12$. Дисперсия потенциальной температуры оказывается несколько выше в экспериментах с трением и увеличивается с ростом коэффициента сопротивления C_D . Необходимо отметить, что рост полной энергии в рассматриваемой системе связан с наличием источника постоянной мощности, который не уравнивается диссипацией вплоть до конца расчетов в каждом из экспериментов. Равновесие между генерацией и диссипацией в кинетической энергии наступает раньше, чем это имеет место для потенциальной энергии.

Если перейти к размерным величинам, то можно заметить, что развитие аномалий температуры с горизонтальным масштабом ~ 10 км в слое толщиной 1 км при потоке тепла с поверхности в 100 Вт/м^2 происходит в течение 10 – 15 часов. В случае реального пограничного слоя атмосферы, ограниченного сверху слоем инверсии, очень быстрый рост размера крупных термиков с одновременным увеличением уровня пульсаций потенциальной температуры, характеризующего величину доступной потенциальной энергии, может приводить к формированию глубокой проникающей конвекции. Источник энергии приблизительно постоянной мощности в пограничном слое атмосферы может формироваться в условиях, когда разность температур между поверхностью и воздухом достаточно велика. Следует заметить, однако, что характерный масштаб, на котором происходит подкачка кинетической энергии, связан с величиной формирующихся аномалий температуры.

Кинетическая энергия рассматриваемого потока генерируется за счет сил плавучести. Переход из доступной потенциальной энергии в кинетическую осуществляется с помощью слагаемого $\alpha \bar{u}_3 \left(\bar{\theta} - \langle \bar{\theta} \rangle_{x_1 x_2} \right)$, присутствующего только в уравнении для вертикальной компоненты кинетической энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \bar{u}_3^2 = \alpha \left(\bar{\theta} - \langle \bar{\theta} \rangle_{x_1 x_2} \right) \bar{u}_3 + \dots$$

С помощью спектрального анализа результатов расчетов можно выделить интервал волновых чисел, в котором кинетическая энергия поступает в систему. Для этого достаточно вычислить коспектр $C_{\theta u_3} = \text{Re}[\hat{u}_3(\vec{k})\hat{\theta}^*(\vec{k})]$, где $\hat{\phi}$ – комплексное преобразование Фурье от соответствующей функции, ϕ^* – операция комплексного сопряжения).

На рис. 5.2.9 приведены предумноженные коспектры $|k_{12}| C_{\theta u_3}(|k_{12}|)$ в зависимости от модуля нормированного горизонтального волнового числа $|k_{12}| = \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$ ($k_i = 2\pi L_i / \lambda_i$, где λ_i – длина волны по оси x_i , $i=1,2$). Эти коспектры построены на каждом расчетном уровне и осреднены по всей толщине слоя $0 \leq x_3 \leq L_3$ для моментов времени $\tilde{t} = 3, 10, 30$ и 50 , соответствующих полям аномалий температуры, изображенным на рис. 5.2.8. Из этого рисунка видно, что по мере развития конвекции максимум генерации энергии смещается в сторону более крупных масштабов.

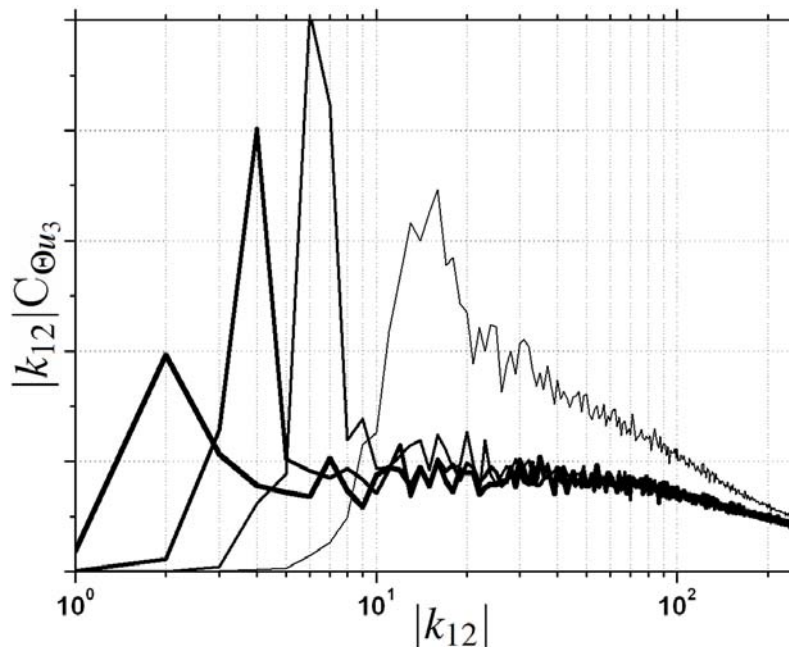


Рис. 5.2.9. Предумноженные коспектры аномалий температуры и вертикальной скорости в зависимости от модуля горизонтального волнового числа, рассчитанные для моментов времени $\tilde{t} = 3, 10, 30$ и 50 (толщина кривых увеличивается с ростом $\tilde{t}$).

Необходимо, однако, заметить, что спектральный анализ, основанный на разложении решения по собственным функциям оператора Лапласа, имеет существенный недостаток. Так, в данном случае поток тепла реализуется в значительной степени за счет сильно вытянутых в плоскости $x_1 x_2$ всплывающих термиков, заметных на рис. 5.2.8 как темные "прожилки" в поле температуры. Поскольку расстояние между такими термиками велико, то при спектральном разложении они дают существенный вклад в длинноволновую составляющую и однозначно интерпретируются как крупномасштабные компоненты решения.

Целесообразно разделить течение на баротропную (двумерную) и бароклинные компоненты, определив баротропную скорость как

$$\begin{aligned}\tilde{u}_i &= F^{bt} u_i \equiv \frac{1}{L_3} \int_0^{L_3} u_i dx_3, \quad (i=1,2), \\ \tilde{u}_3 &= 0,\end{aligned}\tag{5.2.8}$$

а бароклинную – как разность

$$u_i^{bc} = u_i - \tilde{u}_i.\tag{5.2.9}$$

Уравнения движения баротропной компоненты течения представляют собой обычную систему уравнений для двумерной несжимаемой жидкости, включающую в себя дополнительную силу, связанную с влиянием бароклинных течений на баротропные. Получить эту систему можно по аналогии с процедурой формулировки уравнений LES-модели, заменив пространственную фильтрацию на оператор осреднения по вертикальной координате F^{bt} .

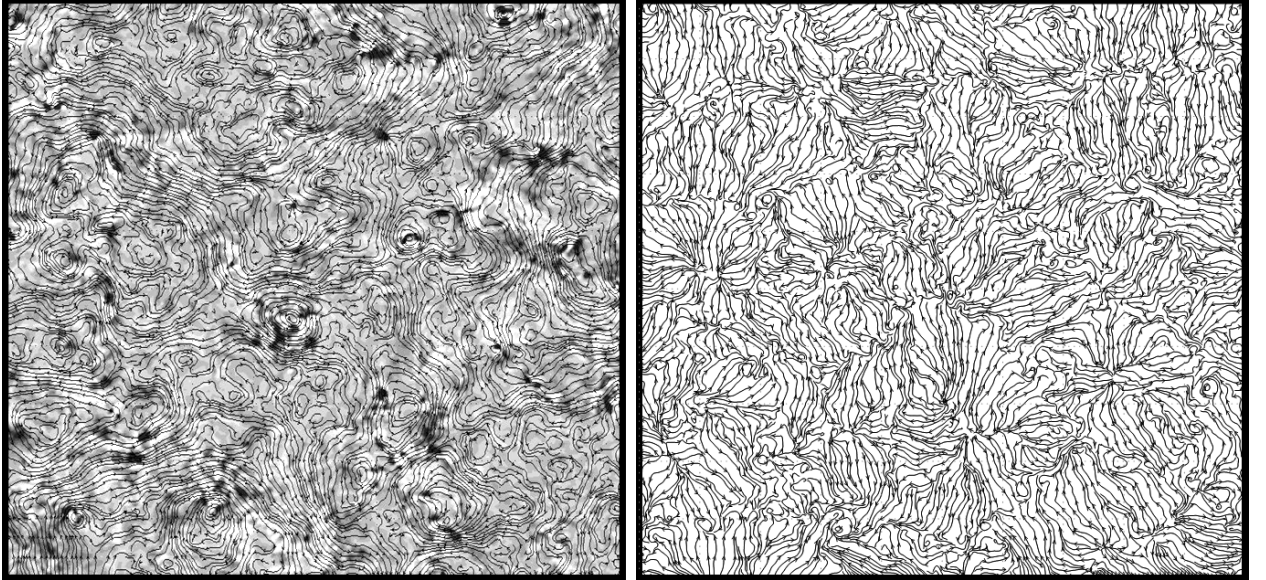


Рис. 5.2.10. Линии тока для баротропной (левая часть рисунка) и бароклинной (правая часть) компонент течения, рассчитанные в эксперименте без трения (с $C_D = 0$).

Легко видеть, что в возникшем "тензоре бароклинных напряжений" составляющие L^{bc} и C^{bc} (см. соотношения (5.2.5)) равны нулю в силу выполнения условия $\tilde{\phi} = \phi$, а напряжения Рейнольдса представлены только нелинейным членом $R_{ij}^{bc} = \overline{u_i^{bc} u_j^{bc}}$. В результате, система уравнений для баротропной компоненты течения может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} &= -\frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial R_{ij}^{bc}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} - \frac{\tau_{i3}(x_1, x_2, L_3) - \tau_{i3}(x_1, x_2, 0)}{L_3}, \\ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} &= 0, \quad i, j = 1, 2.\end{aligned}\tag{5.2.10}$$

На рис. 5.2.10 изображены линии тока для баротропной (левая часть рисунка) и бароклинической (правая часть) компонент течения, рассчитанные в эксперименте с $C_D = 0$. Из рисунка видно, что баротропная компонента удовлетворяет уравнению неразрывности (линии тока не сходятся и не расходятся, некоторые исключения из этого обусловлены дефектами графической обработки). Заметны струйные течения в баротропной компоненте, возникающие вокруг всплывающих и опускающихся крупных термиков. Генерация баротропной энергии $P^{bt} = R_{ij}^{bc} \tilde{S}_{ij}$ и ее диссипация в основном сосредоточены вдоль этих струй и на структурных особенностях течения (P^{bt} отображена на рис. 5.2.10 плотностью штриховки фона – более темный цвет соответствует генерации баротропной компоненты).

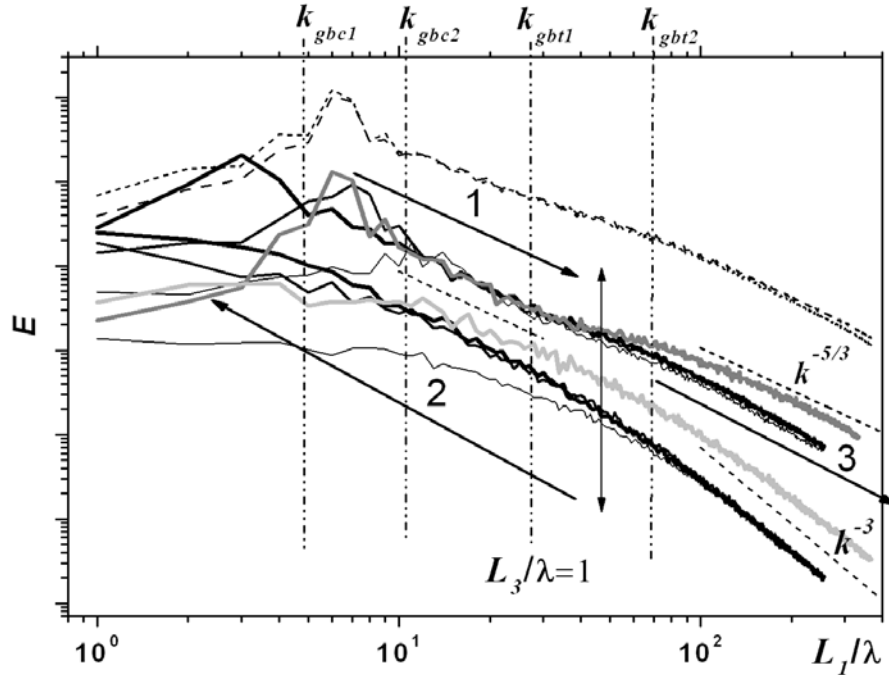


Рис. 5.2.11. Черные сплошные кривые – спектры энергии пульсаций продольных компонент бароклинической u_1^{bc} и баротропной $\tilde{u}_1$ скорости в зависимости от волнового числа $|k_1|$ для моментов времени $\tilde{t} = 10, 30$ и 50 (толщина кривых увеличивается с ростом $\tilde{t}$; спектры для $\tilde{u}_1$ лежат ниже спектров для u_1^{bc}). Серые кривые – соответствующие спектры в зависимости от модуля волнового числа $|k_{12}|$ для $\tilde{t} = 30$. Короткий пунктир – средняя по высоте спектральная плотность дисперсии $15 \langle E_{u_1^{bc}}(|k_{12}|) \rangle_{x_3}$. Длинный пунктир – средний по высоте спектр кинетической энергии $10 \langle E_{\tilde{u}_1^{bc}}(|k_{12}|) \rangle_{x_3}$. Стрелками 1, 2 и 3 отмечены каскады баротропной и бароклинической энергии.

Естественно ожидать, что на масштабах, где влияние бароклинических процессов на баротропные мало, в спектрах энтропии и энергии могут возникать инерционные интервалы с характерными для двумерных течений степенными зависимостями от волнового числа k . Например, в инерционном интервале для трехмерной турбулентности спектр энергии имеет вид (Колмогоров, 1941): $E(k) = c_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}$ (c_K – постоянная Колмогорова, ε – суммарная диссипация кинетической энергии справа от инерционного интервала). Такое распределение энергии по спектру обусловлено ее прямым каскадом от крупных вихрей к мелким (вследствие трехмерности течения) и отсутствием диссипации и генерации энергии на некотором участке. Можно предположить, что если бароклиническая (трехмерная) компонента течения в некотором диапазоне волновых чисел $k_* < k < k_{**}$ ведет себя как трехмерная турбулентность в инерционном интервале, то на этом участке

спектра переходы бароклиной энергии в баротропную и баротропной энергии в бароклиную малы. Если это так, то спектр кинетической энергии для баротропной составляющей течения должен демонстрировать на том же интервале $k_* < k < k_{**}$ наклон, характерный для двумерной турбулентности ($E_{\bar{u}}(k) \sim k^{-3}$ или $E_{\bar{u}}(k) \sim k^{-5/3}$ в зависимости от того, слева или справа от инерционного интервала происходят преобразования энергии из бароклиной в баротропную).

На рис. 5.2.11 представлены одномерные однокомпонентные спектры энергии пульсаций продольных компонент бароклиной u_1^{bc} и баротропной $\tilde{u}_1$ скорости, полученные интегрированием двумерного спектра энергии $E_{u_1}(k_1, k_2) = \hat{u}_1(\vec{k})\hat{u}_1^*(\vec{k})$ по переменной k_2 :

$$E_{u_1}(k_1) = \int_{-k_{2\max}}^{k_{2\max}} E_{u_1}(k_1, k_2) dk_2, \quad k_{2\max} = \frac{\pi L_2}{\Delta x}, \quad (5.2.11)$$

$$E_{u_1}(|k_1|) = E_{u_1}(k_1) + E_{u_1}(-k_1).$$

Эти спектры вычислены для $\tilde{t} = 10, 30$ и 50 (черные сплошные кривые; самые тонкие линии соответствуют $\tilde{t} = 10$, самые толстые – $\tilde{t} = 50$; спектры для баротропной компоненты расположены ниже спектров для бароклиной).

Спектры для бароклиной компоненты течения построены только по одной компоненте скорости и для выделенной плоскости $x_3 = L_3/8$, для которой $\langle (u_1^{bc})^2 \rangle_{x_1 x_2} \approx \langle (u_1^{bc})^2 \rangle_{x_1 x_2 x_3}$. Это не вносит существенных корректив в качественный анализ представленных на рисунке распределений, так как спектры, осредненные по всей толщине слоя, ведут себя приблизительно так же, как и спектры, рассчитанные на высоте $L_3/8$. Пунктирные кривые на рис. 5.2.11 соответствуют значениям $15 \langle E_{u_1^{bc}}(|k_{12}|) \rangle_{x_3}$ (средняя по высоте спектральная плотность дисперсии горизонтальной компоненты скорости; короткий пунктир) и $10 \langle E_{u^{bc}}(|k_{12}|) \rangle_{x_3}$ (средний по высоте спектр кинетической энергии; длинный пунктир). Спектры на выделенной высоте приводятся для большей наглядности рисунка, поскольку при осреднении по одной из координат особенности в кривых сглаживаются за счет суммирования гармоник с сильно отличающимися $|k_{12}|$ и $|k_3|$.

Из рис. 5.2.11 видно, что по мере развития конвекции энергия как бароклиной, так и баротропной составляющей в самой коротковолновой части спектрального интервала ($k > k_{gbt2}$) меняется слабо, что говорит о постоянстве каскада энергии в сторону мелких масштабов и неизменности суммарной диссипации кинетической энергии, определяемой (в отсутствие трения о поверхность) исключительно внутренней диссипацией ε в области больших волновых чисел. Максимум в спектре бароклиной компоненты постепенно сдвигается влево, что соответствует аналогичному перемещению максимума в генерации кинетической энергии за счет сил плавучести. Следует заметить, что слабое убывание $E_{u_1^{bc}}$ в области малых волновых чисел (слева от максимума) является следствием интегрирования по k_2 (суммирования гармоник с малыми k_1 , но большими k_2). Действительно, спектральная плотность распределения бароклиной энергии по модулю волнового числа $E_{u_1^{bc}}(|k_{12}|)$ при малых $|k_{12}|$ убывает гораздо быстрее (темно-серая кривая, соответствующая $\tilde{t} = 30$). В спектре бароклиной компоненты можно выделить

два интервала с зависимостью близкой к $E(k) \sim k^{-5/3}$: мелкомасштабный инерционный интервал $k > k_{gbt2}$ и интервал $k_{gbc2} > k > k_{gbt1}$. Можно предположить, что в интервале волновых чисел $k_{gbt1} > k > k_{gbc2}$ происходят основные преобразования энергии из бароклиной формы в баротропную и из баротропной формы в бароклиную, приводящие, с одной стороны, к появлению изменчивости в $\tilde{u}$, а с другой стороны, к некоторому накоплению и перераспределению бароклиной энергии к правой границе интервала взаимодействия.

Спектр баротропной компоненты течения $E_{\tilde{u}}$ справа от интервала $k_{gbt1} > k > k_{gbc2}$ довольно близко соответствует ожидаемому закону $E(k) \sim k^{-3}$, характерному для интервала спектра, определяемого прямым каскадом энтропии. Слева от этого интервала баротропная энергия растет с уменьшением волнового числа. И в спектрах $E_{\tilde{u}_1}(|k_1|)$, и в спектре $E_{\tilde{u}_1}(|k_{12}|)$, изображенным на рис. 5.2.11 светло-серой кривой, не наблюдается явных максимумов на участке генерации бароклиной энергии $k_{gbc1} > k > k_{gbc2}$, а левее этого участка баротропная энергия практически не убывает. На участке $k_{gbc2} > k > k_{gbt1}$ поздних стадиях развития конвекции наблюдается зависимость, близкая к $E_{\tilde{u}_1}(k) \sim k^{-5/3}$, что характерно для крупномасштабной компоненты двумерных течений в инерционном интервале с обратным каскадом энергии.

Можно предложить следующую схему преобразований кинетической энергии в данной системе, условно разделив ее на баротропную и бароклиную составляющие.

1. Кинетическая энергия поступает в систему за счет преобразования доступной потенциальной энергии в бароклиную кинетическую на масштабе $k_{gbc1} > k_{12} > k_{gbc2}$ (масштаб крупных термиков). Энергия поступает в компоненту u_3^{bc} , но вследствие реализации уравнения неразрывности и наличия верхней и нижней стенок перераспределяется на том же масштабе через градиенты давления в горизонтальные бароклинные составляющие, определяемые горизонтальными компонентами скорости u_1^{bc} и u_2^{bc} .

2. За счет нелинейных взаимодействий и без существенной диссипации и генерации бароклиная энергия переносится в сторону мелких масштабов, формируя первый инерционный интервал $k_{gbc1} > k > k_{gbt1}$ со спектральным распределением, близким к $E_{\tilde{u}^{bc}}(k) \sim k^{-5/3}$ (стрелка, помеченная на рис. 5.2.11 цифрой 1). Следует заметить, что в этом интервале бароклиная (трехмерная) компонента течения не может быть локально изотропной, так как горизонтальный масштаб вихрей достаточно велик, а вертикальный масштаб ограничен расстоянием между стенками (масштаб λ , определяемый высотой расчетной области, $L_3/\lambda=1$, указан на рис. 5.2.11). Однако, для формирования зависимости $E_{\tilde{u}^{bc}}(k) \sim k^{-5/3}$ сама по себе локальная изотропия не требуется. Необходимо только однонаправленный каскад и отсутствие источников и стоков, что, по-видимому, в некотором приближении выполняется.

3. В интервале волновых чисел $k_{gbt1} > k_{12} > k_{gbc2}$, где $k_{12} \sim L_3^{-1}$, происходит существенная перестройка поля бароклиных флуктуаций скорости, так как могут возбуждаться структуры, не захватывающие целиком слой $0 < x_3 < L_3$. При этом флуктуации $\tilde{u}^{bc}$ на этом масштабе еще не являются локально изотропными и создают вынуждающую силу $\tilde{F}_i = -\frac{\partial R_{ij}^{bc}}{\partial x_j}$ для баротропной компоненты течения. Здесь могут происходить преобразования энергии из баротропной в бароклиную и из бароклиной в

баротропную с положительным, в среднем, вкладом в энергию осредненных по всей толщине слоя течений.

4. Энергия баротропной компоненты распространяется от ее источника, в основном, в сторону крупных масштабов (стрелка 2 на рис. 5.2.11), формируя спектральную зависимость $E_{ii} \sim k^{-5/3}$, а также, в меньшей степени, в сторону мелких масштабов (стрелка 3), что в результате каскада энтрофии приводит к распределению $E_{ii} \sim k^{-3}$.

5. Остаток бароклинной кинетической энергии, не преобразованный в баротропную составляющую, передается через прямой каскад нелинейных взаимодействий в сторону мелких масштабов (стрелка 3), где и диссипирует (в случае LES-модели за счет диссипативного вклада замыкания, а в случае реального турбулентного потока – за счет сил молекулярной вязкости).

В экспериментах с трением о поверхность ($C_D \neq 0$) качественная картина развития конвекции практически не изменилась, за исключением того, что в самом конце расчета (при $\tilde{t} = 40 - 55$) вместо крупных ячеек Бенара образовались продольные крупномасштабные валики, ориентированные вдоль диагонали расчетной области и хорошо заметные в поле температуры. Вопрос о том, какие крупномасштабные структуры образуются и как влияет трение о поверхность на их организацию, важен для понимания и параметризации процессов переноса импульса, тепла и влаги в атмосферном пограничном слое и требует отдельного изучения. Это, в том числе, потребует постановки дополнительных численных экспериментов с различными параметрами и еще большими размерами расчетной области.

Выводы. Вихреразрешающая гидродинамическая численная модель, предназначенная для расчета нестационарной трехмерной динамики крупномасштабных вихревых структур в сдвиговых течениях при очень больших числах Рейнольдса, использована для расчета турбулентных потоков в областях сложной конфигурации, в частности, в условиях городской застройки. В модели используется смешанное динамическое замыкание и консервативная схема четвертого порядка точности. Для определения пространственно-временного распределения коэффициента турбулентной вязкости применяется локализованная динамическая процедура, основанная на поиске минимума функционала ошибок тождества Германо. Для решения данной задачи используется предобусловленный проекционно-градиентный метод с автоматическим выбором шага. Построенный алгоритм распараллелен для вычислений на компьютерах с распределенной памятью. Были проведены тестовые численные эксперименты по моделированию турбулентных потоков вокруг плохо обтекаемых тел. Использование параллельных вычислений позволило провести серию длительных численных расчетов с размерностью от одного до десяти миллионов расчетных узлов сетки.

Основным преимуществом предложенной и реализованной модели является ее инвариантность относительно пространственного разрешения. Немаловажным свойством динамических локализованных замыканий оказалась их способность автоматически идентифицировать и подавлять численную неустойчивость за счет локального в пространстве увеличения диссипации. При этом в остальной расчетной области модель остается менее диссипативной, чем при использовании стандартных нединамических подходов к параметризации подсеточной турбулентности.

Несмотря на значительное увеличение численных затрат, необходимое при реализации локализованного динамического турбулентного замыкания, этот подход можно рассматривать как один из наиболее перспективных методов построения вихреразрешающих моделей большой размерности. В приложении к геофизике эти модели необходимы для решения таких задач как расчет обтекания городской застройки, перенос малоинерционных примесей в атмосферном пограничном слое над

орографически неоднородной поверхностью, расчет подледных течений в океанском пограничном слое и т.д.

Вихреразрешающая модель пограничного слоя атмосферы была также использована для воспроизведения спектральных свойств термической конвекции Рэлея-Бенара в двояко-периодическом канале с твердыми стенками как одного из возможных аналогов многомасштабной атмосферной турбулентности. Большое отношение горизонтального размера канала к вертикальному обеспечило существование квазидвумерных крупномасштабных компонент течения, а размер равномерной расчетной сетки в несколько десятков миллионов узлов позволил явно воспроизвести динамику мелкомасштабной трехмерной турбулентной составляющей. Анализ результатов численных экспериментов показал, что конвекция начинается с мелкомасштабных, хаотически расположенных, всплывающих и опускающихся термиков, которые, объединяясь, образуют конвективные ячейки неправильной формы (в том числе, и деформированные шестиугольные ячейки) примерно одинакового размера, сравнимого с расстоянием между стенками. Затем ячейки начинают сливаться между собой и укрупняться до тех пор, пока размер самых больших аномалий не достигает размера расчетной области модели. В каждый момент времени на фоне крупных ячеек наблюдаются мелкомасштабные аномалии.

Декомпозиция изучаемого турбулентного течения на баротропную и бароклинную составляющие позволила предложить следующую схему преобразований кинетической энергии в данной системе. Кинетическая энергия поступает в систему за счет преобразования доступной потенциальной энергии в бароклинную кинетическую на масштабе крупных термиков (через вертикальную компоненту скорости) и перераспределяется на том же масштабе через градиенты давления в бароклинные составляющие, определяемые горизонтальными компонентами скорости. За счет нелинейных взаимодействий и без существенной диссипации и генерации бароклинные энергия переносится в сторону мелких масштабов, формируя первый инерционный интервал со спектральным распределением, близким к закону $k^{-5/3}$. В интервале волновых чисел, связанных с близкими к вертикальному размеру расчетной области масштабами, происходит существенная перестройка поля бароклиновых флуктуаций скорости, обеспечивающая преобразования энергии из баротропной в бароклинную и обратно с положительным, в среднем, вкладом в энергию осредненных по всей толщине слоя течений. Энергия баротропной компоненты распространяется от ее источника, в основном, в сторону крупных масштабов, формируя спектральную зависимость $E_{ii} \sim k^{-5/3}$, а также, в меньшей степени, в сторону мелких масштабов, что в результате каскада энтропии приводит к распределению $E_{ii} \sim k^{-3}$. Остаток бароклиновой кинетической энергии, не преобразованный в баротропную составляющую, передается через прямой каскад нелинейных взаимодействий в сторону мелких масштабов, где и диссипирует (в случае LES-модели за счет диссипативного вклада замыкания, а в случае реального турбулентного потока - за счет сил молекулярной вязкости).

Учет пристеночного трения не меняет существенно качественную картину развития конвекции, за исключением того, что вместо крупных ячеек Бенара могут формироваться продольные крупномасштабные валики, хорошо заметные в поле температуры. Вопрос о том, какие крупномасштабные структуры образуются и как влияет трение о поверхность на их организацию, важен для понимания и параметризации процессов переноса импульса, тепла и влаги в атмосферном пограничном слое (Глазунов и Дымников, 2012). Это, в том числе, требует постановки дополнительных численных экспериментов с различными параметрами и еще большими размерами расчетной области. Целесообразны также дальнейшие исследования, направленные на воспроизведение реальных мезомасштабных атмосферных процессов LES-моделями с

динамическим турбулентным замыканием и последующий анализ спектральных свойств получаемых энергетических характеристик.

5.3. Мезомасштабные процессы

Региональные (в частности, мезомасштабные) атмосферные модели являются эффективным инструментом решения многих задач физики атмосферы, в особенности, прогноза погоды и климатических изменений. Качество прогнозов атмосферных моделей совершенствуется посредством повышения пространственного разрешения, выбора более точных численных схем и усложнения параметризаций подсеточных процессов. Развитие модели в любом из перечисленных направлений приводит к существенному росту вычислительных затрат. Поэтому ведущие региональные модели нацелены на использование многопроцессорных вычислительных систем.

Большинство кластерных систем в настоящее время имеют один или два уровня распределения вычислений, основанные на использовании распределённой памяти или на комбинации общей и распределённой (т.н. «гибридная» двухуровневая архитектура). Для этой архитектуры реализованы многие атмосферные модели (например, региональные модели MM5 и WRF), и они демонстрируют хорошую масштабируемость вплоть до нескольких сотен процессоров. Однако простое наращивание количества процессорных узлов часто оказывается недостаточно эффективным. Высокая стоимость и энергоёмкость традиционных однородных вычислительных систем заставляет искать принципиально иные технологические решения. Одно из перспективных направлений состоит в повышении количества уровней гибридности за счет оснащения систем специализированными вычислителями типа CellBE или графических ускорителей. Сокращение поддержки некоторых второстепенных функций традиционных процессоров, упрощение системной логики, и, как следствие, возможность упаковки большого числа «легковесных» ядер позволяет получить высокоэффективное устройство для решения вычислительных задач.

В НИВЦ МГУ развивается региональная атмосферная модель NH3D_MPI с реализацией программного кода на многопроцессорных вычислительных системах на основе стандарта MPI, исходным программным комплексом для которой послужил последовательный код мезомасштабной модели NH3D (Non-Hydrostatic 3-Dimensional, Miranda and James, 1992), созданной в Университете г. Рединга (Великобритания). Развитие региональной модели шло за счет параметризации переноса коротковолновой и длинноволновой радиации в атмосфере, разработки модели гидротермодинамики водоемов и включения блока переноса атмосферной примеси (Степаненко и Микушин, 2008). В настоящее время модель применяется для исследования мезомасштабных циркуляций атмосферы над гидрологически неоднородной территорией (см., например, Степаненко и др., 2006) и в образовательном процессе на географическом факультете и факультете ВМК МГУ.

Краткое описание модели. Мезомасштабная модель основана на трехмерной негидростатической системе уравнений термодинамики атмосферы, записанной в декартовой σ -системе координат (Miller and White, 1984, см. также раздел 1.5):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u p_*}{\partial t} + \frac{\partial u^2 p_*}{\partial x} + \frac{\partial v u p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} u p_*}{\partial \sigma} &= -p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial x} + \sigma \frac{\partial p_*}{\partial x} \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} + f(v - V_g) p_* + p_* (D_u + R_u), \\ \frac{\partial v p_*}{\partial t} + \frac{\partial v u p_*}{\partial x} + \frac{\partial v^2 p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} v p_*}{\partial \sigma} &= -p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial y} + \sigma \frac{\partial p_*}{\partial y} \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} - f(u - U_g) p_* + p_* (D_v + R_v), \\ \frac{\partial \tilde{w} p_*}{\partial t} + \frac{\partial u \tilde{w} p_*}{\partial x} + \frac{\partial v \tilde{w} p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} \tilde{w} p_*}{\partial \sigma} &= -S p_* \frac{\partial \Phi'}{\partial \sigma} + p_* g \left(\frac{\theta'}{\theta_b} - q_r \right) + p_* (D_w + R_w), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p_*}{\partial t} + \frac{\partial u p_*}{\partial x} + \frac{\partial v p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} p_*}{\partial \sigma} &= 0, \\
\frac{\partial \theta' p_*}{\partial t} + \frac{\partial u \theta' p_*}{\partial x} + \frac{\partial v \theta' p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} \theta' p_*}{\partial \sigma} &= S \tilde{w} p_* \frac{\partial \theta_b}{\partial \sigma} + p_* \frac{L_v}{c_p} \left(\frac{p_0}{p} \right)^k (C - E) + p_* (D_\theta + R_\theta), \\
\frac{\partial q p_*}{\partial t} + \frac{\partial u q p_*}{\partial x} + \frac{\partial v q p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} q p_*}{\partial \sigma} &= p_* (E - C) + p_* (D_{q_v} + R_{q_v}), \\
\frac{\partial q_c p_*}{\partial t} + \frac{\partial u q_c p_*}{\partial x} + \frac{\partial v q_c p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} q_c p_*}{\partial \sigma} &= p_* (C - A) + p_* (D_{q_c} + R_{q_c}), \\
\frac{\partial q_r p_*}{\partial t} + \frac{\partial u q_r p_*}{\partial x} + \frac{\partial v q_r p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} q_r p_*}{\partial \sigma} &= p_* (A - E) - g \frac{\partial \rho w_{gr} q_r}{\partial \sigma} + p_* (D_{q_r} + R_{q_r}).
\end{aligned} \tag{5.3.1}$$

Здесь, дополнительно к ранее введенным обозначениям, (U_g, V_g) – вектор геострофического ветра; q – удельная влажность; q_c – концентрация облачных капель; q_r – концентрация дождевых капель; w_{gr} – скорость падения дождевых капель; D_ϕ , $\phi = u, v, \tilde{w}, \dots$ – слагаемые, описывающие турбулентную диффузию соответствующих субстанций; R_ϕ , $\phi = u, v, \tilde{w}, \dots$ – источники соответствующих субстанций; E – интенсивность испарения капель; C – интенсивность конденсации водяного пара; A – суммарная интенсивность захвата облачных капель осадками и автоконверсии. Термодинамические переменные в системе (5.3.1) представлены в терминах мезомасштабных отклонений (обозначены штрихами) от характеристик фонового состояния (обозначены нижним индексом b). Кроме уравнений для трех компонент скорости, уравнений притока тепла и неразрывности, в систему также входят прогностические уравнения для содержания атмосферной влаги в трех ее состояниях: водяного пара, облачных и дождевых капель. При расчете влагосодержания учитываются процессы испарения, конденсации, автоконверсии и захвата облачных капель осадками, однако, процесс образования кристаллов льда в облаках не рассматривается. Потоки тепла, влаги и количества движения в приземном слое рассчитываются с помощью уравнений аэродинамического метода, в которых учитывается транспирация влаги растительностью.

Процессы тепловлагообмена в почве и растительности рассчитываются либо с помощью модели ISBA (Mahfouf, 1987), либо на основе подходов, развиваемых в ИВМ РАН и НИВЦ МГУ (см. раздел 2.3). Кроме того, в модель включены блоки расчета переноса длинноволнового излучения в атмосфере (Chou et al., 2001) и коротковолнового излучения (Chou and Suarez, 1999), а для физически адекватного расчета взаимодействия атмосферы с водоемами – модель гидротермодинамики водоема (Степаненко и Лыков, 2005, см. также раздел 2.3). Процесс переноса мезомасштабными течениями пассивной примеси, выбрасываемой в атмосферу из источников на поверхности Земли, рассчитывается подобно тому, как это сделано для переноса водяного пара. Соответствующее уравнение для концентрации примеси q_t имеет следующий вид (Степаненко и Микушин, 2008):

$$\frac{\partial q_t p_*}{\partial t} + \frac{\partial u q_t p_*}{\partial x} + \frac{\partial v q_t p_*}{\partial y} + \frac{\partial \dot{\sigma} q_t p_*}{\partial \sigma} = p_* (D_{q_t} + R_{q_t}). \tag{5.3.2}$$

Во многих региональных моделях учитывается только вертикальная диффузия, так что в уравнениях движения, притока тепла и переноса – диффузии примесей присутствуют только первые производные по горизонтальным координатам (в слагаемых

адвекции). Это приводит к необходимости задания граничных условий только в тех точках боковых границ, где поток направлен внутрь области интегрирования. Это налагает соответствующие требования на построение численных схем (в частности, шаблонов конечно-разностных схем в граничных точках). В некоторых методических численных экспериментах используются периодические граничные условия, которые фактически означают, что рассматривается бесконечный по горизонтали периодический поток. Очевидно, однако, что такие условия не могут быть применены для воспроизведения реальных атмосферных потоков.

В более общем случае существует несколько вариантов задания боковых граничных условий (Pielke, 2002). В одном из наиболее распространенных вариантов, в тех точках границы, где поток направлен внутрь области, задаются условия Дирихле, а в точках, где поток покидает область, предполагаются однородные условия Неймана. В частности, такого типа условия требуются, если в уравнения входит горизонтальная диффузия, а также при решении уравнения Пуассона для давления или геопотенциала. Условия Дирихле задаются на основе априорной информации, независимой от результатов расчетов региональной модели. Однако, в связи с этим возникает следующая проблема. Волновые компоненты решения (например, гравитационные волны) могут распространяться против потока и влиять на значения прогностических величин в тех частях боковой границы, где течение направлено внутрь расчетной области. При задании условий Дирихле это влияние не учитывается, в результате чего волны отражаются от границы внутрь области, как от твердой стенки. Для того, чтобы исключить такой нежелательный эффект, было предложено использовать условия излучения (Orlanski, 1976), формально представляющие уравнение переноса с некоторой фазовой скоростью и которые позволяют по крайней мере частично исключить эффект отражения. Однако, проблемой теперь становится вычисление фазовой скорости (см., например, Miranda and James, 1992).

Опыт нескольких десятилетий численного интегрирования моделей с ограниченной по горизонтали областью показывает, что при любой постановке граничных условий вдоль боковых границ в полях зависимых переменных возникают нефизические возмущения. Для подавления этих возмущений вдоль границ вводят буферную зону (зона «губки»), в пределах которой в уравнения модели включают дополнительные слагаемые, релаксирующие («притягивающие») решение к некоторым физически согласованным полям. В качестве таких полей могут служить средние в области интегрирования профили зависимых величин, поля реанализа или поля глобальной модели.

В последние годы при региональном моделировании с привлечением данных глобальных моделей стала активно использоваться идея усвоения данных. Так, в работе (Storch et al., 2000) был предложен метод «спектрального возбуждения» (spectral nudging) полей региональной модели полями глобальной модели. В основе метода лежит предположение, что крупномасштабные моды, попадающие в область региональной модели, лучше воспроизводятся глобальной моделью, поскольку в этой модели взаимодействие соответствующих этим модам крупномасштабных возмущений с окружающими атмосферными образованиями воспроизводится явно, а в региональной модели — только через граничные условия. Для релаксации крупномасштабных мод региональной модели к крупномасштабным модам глобальной модели, в процессе интегрирования системы уравнений региональной модели регулярно производится релаксация коэффициентов длинноволновых компонент Фурье-разложения прогностических полей. В результате, расчеты по двум моделям оказываются значительно более согласованными, в частности не наблюдается «дрейфа» региональной модели от полей глобальной модели в соответствующей области.

В обсуждаемых ниже численных экспериментах использовались следующие граничные условия. На горизонтальных границах ставится условие излучения:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0,$$

где ϕ – любая из прогностических величин; c – некоторая фазовая скорость; n – нормаль к границе. Использование этого условия позволяет практически исключить обратное отражение от границ гравитационных волн, возникающих внутри расчетной области. На верхней границе области задаются однородные граничные условия: производные по вертикальной координате от всех неизвестных величин равны 0. Используются также кинематические условия: $\dot{\sigma} = 0$ при $\sigma = 0$ и $\sigma = 1$. Для дополнительной фильтрации мелкомасштабных возмущений используется слой поглощения, состоящий из нескольких σ -слоев, прилегающих к этой границе, в котором на каждом шаге по времени применяется пространственное сглаживание переменных. В модели учтена возможность введения слоев поглощения и вдоль горизонтальных границ.

Реализация модели на вычислительных системах с распределенной памятью.

Применяемые в модели алгоритмы делятся на две группы: решения эволюционных уравнений и решения эллиптического уравнения (1.5.26) для геопотенциала. Для решения эволюционных уравнений используется явная схема «чехарда» с центральными разностями (на сдвинутых сетках) по пространству. Решение конечно-разностного аналога эллиптического уравнения осуществляется в три этапа. На первом этапе производится двумерное быстрое преобразование Фурье (БПФ) правой части уравнения, затем производятся прогоны по вертикальной координате, и к полученному решению применяется обратное БПФ.

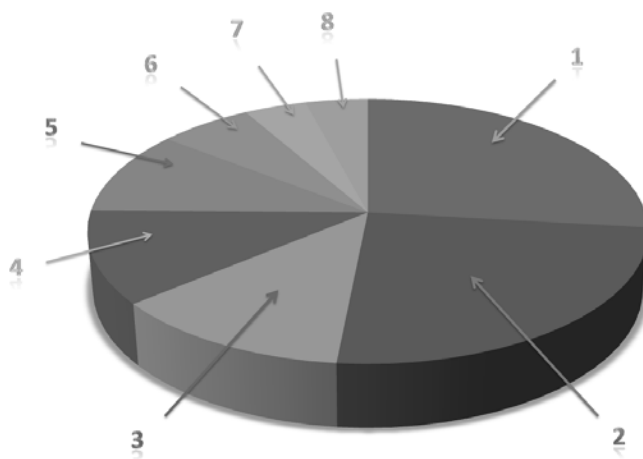


Рис. 5.3.1. Результаты профилирования последовательного кода региональной атмосферной модели: 1 – радиационный блок и уравнение для температуры (26%), 2 – эллиптическое уравнение для отклонения геопотенциала (24%), 3 – уравнение неразрывности (12%), 4 – расчет диффузионных слагаемых в уравнениях импульса и скаляров (11%), 5 – уравнения движения (10%), 6 – вычисление адвективных слагаемых (6%), 7 – интегрирование уравнения для удельной влажности (4%), 8 – параметризация деятельного слоя суши и водоёмов (4%).

На рис. 5.3.1 представлены результаты профилирования последовательной версии рассматриваемой региональной модели. Как видно из этой диаграммы, основные вычислительные затраты в модели приходятся на (одномерный) радиационный блок и расчет соответствующих тенденций для температуры, а также на решение эллиптического уравнения для геопотенциала.

Параллельная версия программного кода модели построена с применением стандарта MPI. Численная схема модели протестирована на суперкомпьютерах СКИФ-МГУ «Чебышев» и MVS-50000 (МСП РАН). На рисунке 5.3.2 показано ускорение алгоритма решения уравнений движения на компьютере СКИФ-МГУ. Как видно из

рисунка, достигнуто сверхлинейное ускорение, что, по всей видимости, вызвано более эффективным использованием кэш-памяти при уменьшении подобластей (размеров массивов на каждом процессе, поскольку количество узлов разностной сетки во всех экспериментах было одинаковым). Такое ускорение наблюдалось при распределении вычислений «один процесс на один узел». В случае же запуска нескольких процессов в пределах одного узла ускорение оказалось меньше линейного. Возможности обменных сетей традиционных кластерных систем не позволяют эффективно реализовывать параллельные алгоритмы со значительной долей обменов данными. В частности, использование быстрого преобразования Фурье в региональной модели приводит к «насыщению» ускорения модели на нескольких сотнях процессоров. В настоящее время модель реализована на суперкомпьютере «Ломоносов».

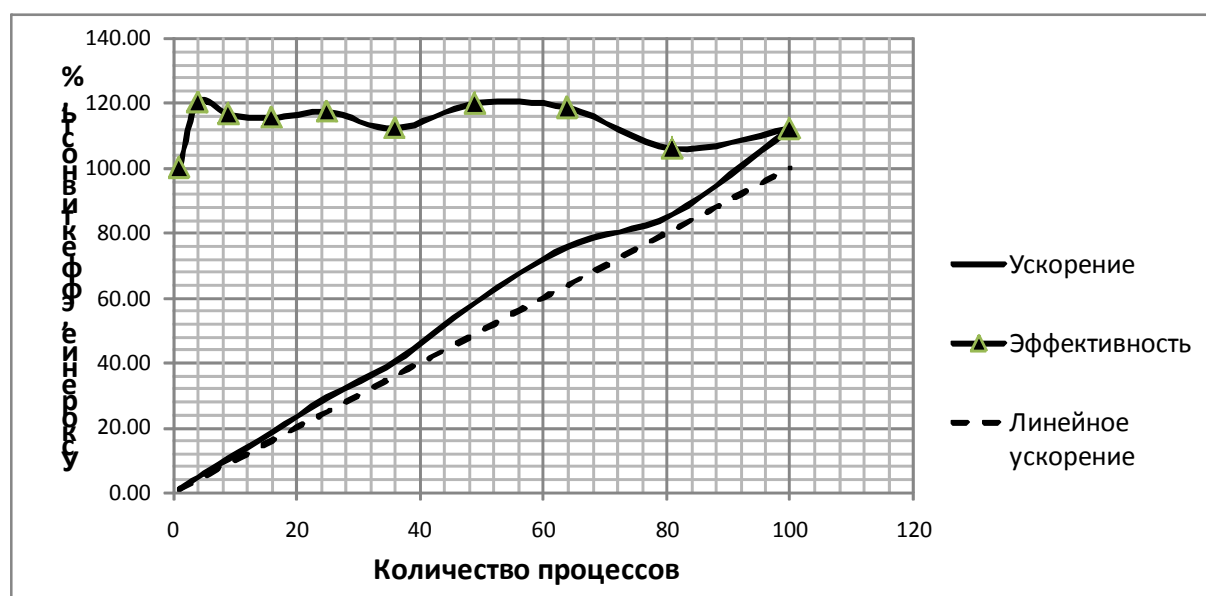


Рис. 5.3.2. Ускорение алгоритма явной схемы уравнений движения региональной атмосферной модели на суперкомпьютере СКИФ-МГУ «Чебышев».

Численное моделирование мезомасштабной циркуляции над гидрологически неоднородной сушей. В параметризации процессов подсеточных масштабов важное место занимает взаимодействие атмосферы с гидрологически неоднородной сушей – территорией, покрытой густой сетью водных объектов (озера, реки, болота и т.п.) и занимающих значительную ее часть (Степаненко и др., 2006). Ярким примером такой гидрологической неоднородности может служить Западная Сибирь (доля площади, занятая водными объектами, местами превышает 50%), Карелия, Северная Америка. Вследствие различий в механизме теплообмена в водных объектах и почве (грунте) распределение температуры на такой территории очень неоднородно: днем водоемы представляют «холодные пятна», ночью – «острова тепла», что приводит к формированию бризовых циркуляций в пограничном слое атмосферы. При сильном синоптическом потоке бризовая циркуляция практически не выражена, но и в этом случае озера значительно влияют на процессы взаимодействия атмосферы с поверхностью суши (Mahrt, 2000). Дело в том, что возникающие над озерами внутренние термические пограничные слои днем характеризуются пониженным в сравнении с окружающей сушей уровнем турбулентности (в силу устойчивой термической стратификации), а ночью, напротив, повышенным. В результате днем над озерами турбулентные потоки явного и скрытого тепла существенно меньше, а ночью, соответственно, больше, чем над окружающей территорией.

Неоднородность распределения турбулентных потоков тепла и влаги над гидрологически неоднородной территорией вызывает следующую проблему в моделировании общей циркуляции атмосферы. В крупномасштабных моделях (в частности, климатических и численного прогноза погоды) взаимодействие атмосферы с подстилающей поверхностью осуществляется через турбулентные потоки в приземном слое, осредненные по площади конечно-разностной ячейки модели. Значения осредненных потоков не могут быть вычислены напрямую, поскольку их подсеточное распределение в рамках данных моделей не воспроизводится. Поэтому используют ту или иную процедуру агрегирования потоков. Общепринятый метод агрегирования заключается в следующем. В предположении справедливости формул аэродинамического метода (Монин и Яглом, 1965, см. также раздел 2.2), средние по модельной ячейке потоки рассчитываются исходя из средних значений температуры воздуха, скорости ветра и влажности, причем наличие различных типов подстилающей поверхности в пределах ячейки учитывается с помощью мозаичного подхода. Однако, в силу нелинейности аэродинамических формул, турбулентный поток, рассчитанный по средним величинам, будет отличаться от потока, осредненного по ячейке, что может приводить к систематическим ошибкам в воспроизведении температуры подстилающей поверхности (Mahrt, 1987).

Пусть некоторая территория с размерами модельной ячейки покрыта некоторым количеством M сегментов подстилающей поверхности различных типов. Каждый тип может занимать как односвязную область, так и неодносвязную (в случае гидрологической неоднородности суши). В рамках мозаичного подхода для каждого типа поверхности рассчитывается свой тепловой баланс, причем атмосферное воздействие (набор значений атмосферных параметров в приземном слое, таких как температура, влажность, скорость ветра, суммарная солнечная радиация и встречное излучение атмосферы) один и тот же для всех типов. Последнее обстоятельство является одним из источников систематической ошибки, поскольку, разумеется, над различными типами подстилающей поверхности метеорологические величины принимают различные значения. Для каждого, i -го, типа поверхности рассчитываются свои значения потоков тепла, влаги и количества движения (H_i , LE_i и τ_i , соответственно), после чего вычисляются средние значения потоков по данной территории:

$$(\tilde{H}, \tilde{LE}, \tilde{\tau}) = M^{-1} \sum_{i=1}^M \mu_i (H_i, LE_i, \tau_i), \quad (5.3.3)$$

где μ_i – доля площади рассматриваемой территории, занятая i -м типом поверхности.

В данном подходе не учитывается подсеточная изменчивость метеорологических полей, вызванная наличием мезомасштабных циркуляций. Значение подсеточной (мезомасштабной) изменчивости можно продемонстрировать на примере «штилевой» ситуации, в которой скорость синоптического ветра, вычисляемая крупномасштабной моделью, близка к 0 м/с. В этом случае в рамках мозаичного подхода потоки над каждым типом подстилающей поверхности будут рассчитываться для практически безветренных условий, в то время как в действительности они формируются при значительных локальных скоростях ветра (например, в бризовых течениях). Поскольку, как правило, чем больше скорость ветра, тем турбулентный обмен интенсивнее, мозаичный подход должен занижать осредненные по площади модельной ячейки подсеточные потоки. Естественно ожидать, что при увеличении скорости синоптического потока ошибка мозаичного метода будет уменьшаться, поскольку мезомасштабные циркуляции будут подавляться, а связанная с ними подсеточная изменчивость метеорологических полей станет пренебрежимо малой.

В численных экспериментах с мезомасштабной моделью в явном виде воспроизводится подсеточная для крупномасштабных моделей изменчивость турбулентных потоков в приземном слое. По рассчитанным в рамках такой модели потокам можно вычислить средние по области интегрирования значения, принимаемые в качестве «истины»:

$$(\bar{H}, \bar{LE}, \bar{\tau}) = S^{-1} \iint_S (H, LE, \tau) ds, \quad (5.3.4)$$

где S – площадь области. Далее, по аналогичным формулам вычисляются средние по области значения составляющих скорости ветра, температуры воздуха и влажности, имитирующие крупномасштабный поток, рассчитываемый в крупномасштабной модели. Используя эти значения, в рассматриваемой области по формулам (5.3.3) вычисляются агрегированные турбулентные потоки, которые затем сравниваются с «истинными».

С описанной выше моделью проведен две серии численных экспериментов. В первой серии в качестве расчетной области использовался квадрат со стороной размером 360 км, в центре которого располагалось одиночное озеро (глубиной в 2 м) эллипсоидальной формы с полуосями равными 70 км и 40 км (рис. 5.3.3). Шаг по пространственным координатам составил 10 км, по времени 5 с, а количество σ -уровней по вертикали – 21. Конечно-разностная сетка по координате σ во всех экспериментах была принята неравномерной: в пограничном слое она сгущалась, причем нижний уровень находился на высоте ~ 35 м над поверхностью. Верхняя граница области интегрирования располагалась на изобарической поверхности 200 гПа. Фоновая стратификация задавалась устойчивой: вертикальный градиент потенциальной температуры составлял 3 К/км до высоты 5 км, выше 5 км потенциальная температура возрастала с меньшим градиентом. Все эксперименты проводились для летнего времени года, поскольку именно летом наблюдаются максимальные термические контрасты между различными ландшафтами, и бризовые циркуляции получают максимальное развитие.

В экспериментах не учитывались процессы конденсации и выпадения осадков. Продиктовано это тем, что мезомасштабные циркуляции (по крайней мере, в части местных ветров) наиболее развиты в безоблачных условиях. При сплошной облачности приток солнечной радиации снижается и термические контрасты на подстилающей поверхности ослабевают. Осадки также способствуют выравниванию пространственного поля температуры, поскольку приводят к повсеместному снижению потоков явного тепла.

В численных экспериментах варьировались следующие входные параметры: скорость геострофического (синоптического) ветра, начальное влагосодержание почвы и залесенность (относительная доля области, занятой лесами). Скорость геострофического ветра определяет степень мезомасштабной изменчивости потока: при ее увеличении мезомасштабная изменчивость ослабевает, поскольку, в частности, не успевает сформироваться пространственная неоднородность поля температуры воздуха, связанная с дифференцированным нагревом над водными объектами и ландшафтами суши. Начальная влажность почвы, по результатам разных авторов (Lynn et al., 1996), существенно влияет на развитие циркуляций бризового типа: при увеличении влажности возрастает поток скрытого тепла, а поток явного тепла убывает. Чем меньше поток явного тепла, тем слабее нагревается атмосфера над сушей в дневное время суток, и тем слабее оказывается бризовая циркуляция. Растительность также воздействует на турбулентные потоки, контролируя дневной нагрев и ночное охлаждение пограничного слоя, а, тем самым, и соответствующее развитие мезомасштабных циркуляций.

В контрольном эксперименте скорость геострофического ветра принималась равной 0 м/с, влажность почвы 65%, залесенность – 50%. На рис. 5.3.3 представлен дневной бриз. Как видно из рисунка, ветер направлен с озера на сушу, причем заметно отклоняется вправо под действием силы Кориолиса. Максимальные скорости ветра

достигают 1.4 м/с; это значение лежит в характерном диапазоне скоростей приземного бриза 1 – 5 м/с (Бурман, 1969).

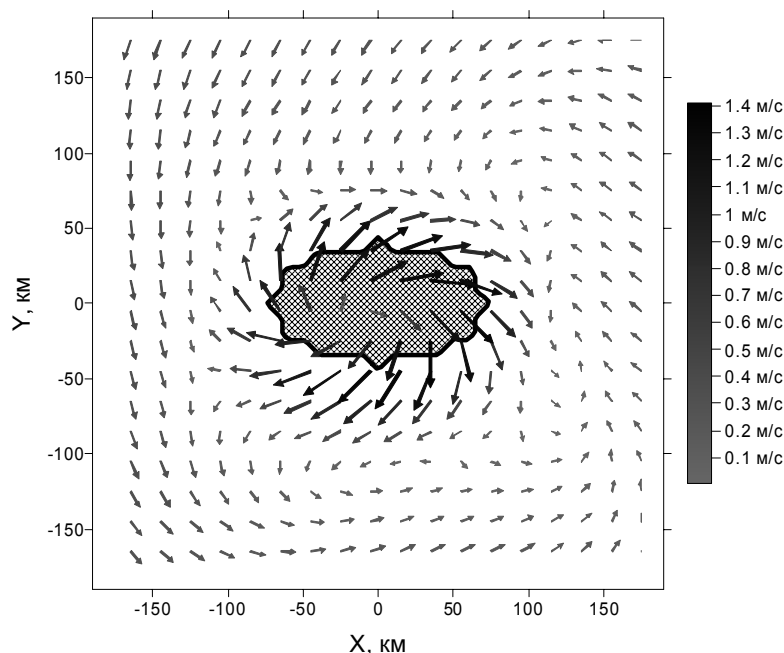


Рис. 5.3.3. Горизонтальное поле ветра на нижней σ - поверхности (примерно 35 м над подстилающей поверхностью) в местный полдень (12:00). Длина стрелок и оттенки серого цвета показывают модуль скорости. Заштрихованная область в центре квадрата – озеро. Ось X направлена с запада на восток, ось Y – с юга на север.

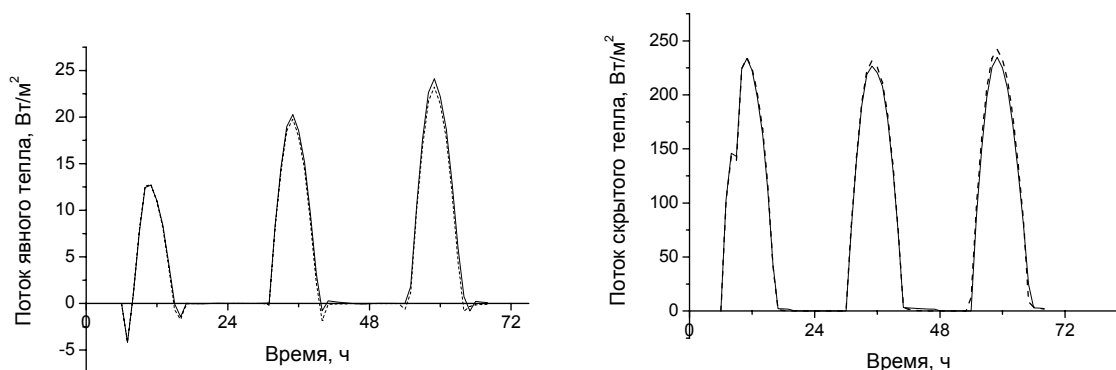


Рис. 5.3.4. Временной ход потоков явного (слева) и скрытого (справа) тепла, осредненных по области интегрирования (контрольный эксперимент). Сплошной линией показан поток, полученный по мозаичному методу агрегирования, пунктиром – рассчитанный по результатам мезомасштабного моделирования.

На рис. 5.3.4 представлен временной ход потоков явного и скрытого тепла, осредненных по области расчета, а также рассчитанных по мозаичному методу. Как следует из рисунка, кривые практически совпадают. Это объясняется небольшими скоростями ветра в бризе, которые не вызывают существенного подсеточного усиления потоков. В одном из экспериментов влажность почвы была принята равной 20%, а растительность отсутствовала. Увеличение потоков явного тепла за счет уменьшения влажности почвы и залесенности привело к бурному развитию мезомасштабной циркуляции: максимальные скорости ветра достигали 7 м/с и более. В результате, ошибки агрегирования потоков с помощью мозаичного подхода (рис. 5.3.5) оказались больше, чем

в контрольном эксперименте. Однако для дневного времени суток они по-прежнему не превышают 10%, что можно считать хорошим результатом. Из рис. 5.3.5 также следует, что ночные потоки явного тепла существенно отличны от нуля, достигая по модулю величины 20 – 30 Вт/м² вследствие высоких скоростей ветра. Следует заметить, что бриз, полученный в данной эксперименте, является в своем роде экстремальным: в природе его скорость редко достигает 7 м/с. Поэтому, если в условиях такой интенсивной мезомасштабной циркуляции мозаичный подход показал приемлемые результаты, то можно предположить, что он применим и для большинства внутримассовых мезомасштабных циркуляций.

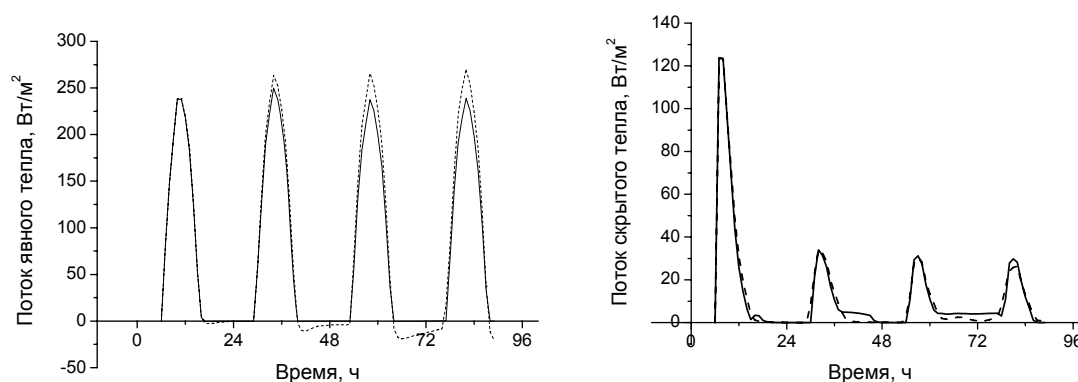


Рис. 5.3.5. Временной ход потоков явного (слева) и скрытого (справа) тепла, осредненных по области интегрирования (влажность почвы – 20%, залесенность – 0%). Сплошной линией показан поток, полученный по мозаичному методу агрегирования, пунктиром – рассчитанный по результатам мезомасштабного моделирования.

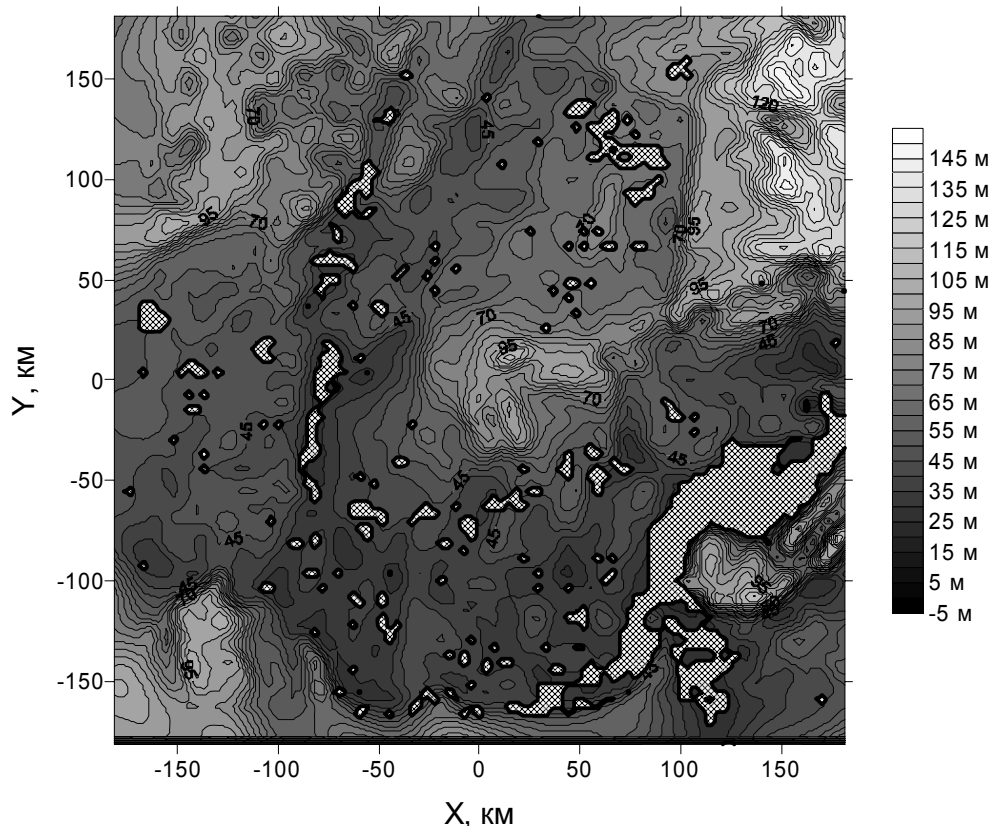


Рис. 5.3.6. Область расчета в численных экспериментах. Оттенками серого цвета показаны абсолютные высоты рельефа, заштрихованные области – водоемы и переувлажненные территории.

Во второй серии экспериментов качестве области расчета использовался квадратный участок Западной Сибири с координатами $54.5 - 58.6^\circ$ с.ш., $63.1 - 66.6^\circ$ в.д (рис. 5.3.6). Размеры участка составляют 355×355 км², а шаг по пространственным координатам – 3.7 км. Остальные параметры конечно-разностной сетки совпадали с использованными в первой серии. Выбранный район представляет собой хороший пример гидрологической неоднородности подстилающей поверхности, поскольку на ней находится большое количество водоемов и переувлажненных территорий (болот).

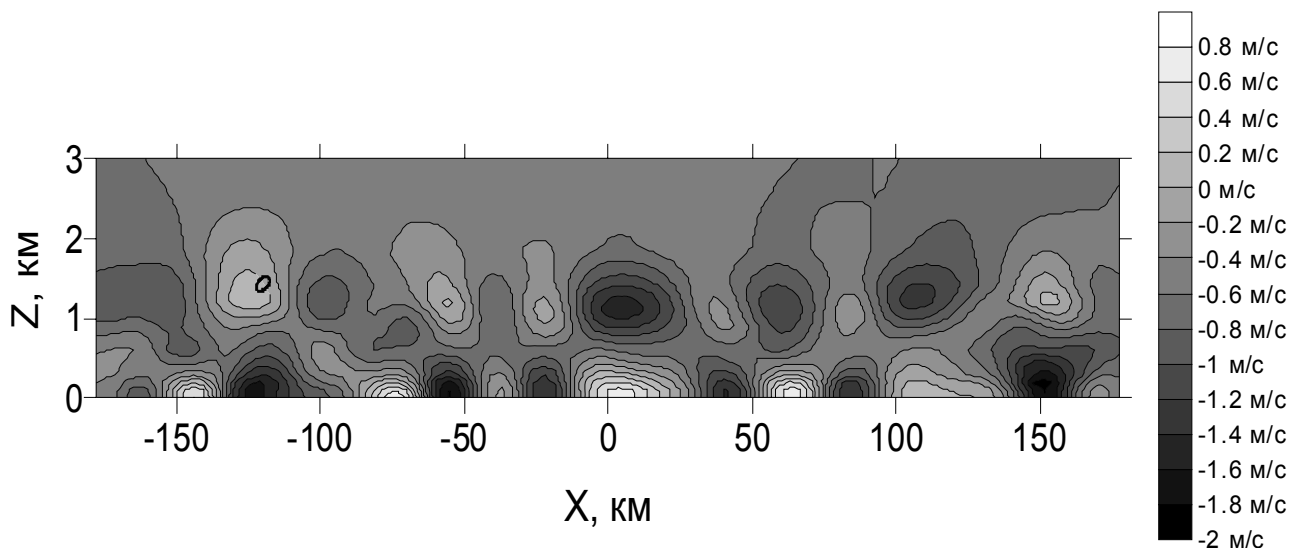


Рис. 5.3.7. Зональная скорость ветра в вертикальной плоскости $y = 0$ в местный полдень (12:00) над участком Западной Сибири (контрольный эксперимент). Видны многочисленные бризовые циркуляционные ячейки. Шкала справа показывает градации скорости.

На рис. 5.3.7 изображена зональная скорость ветра в вертикальном сечении плоскостью $y = 0$ в местный полдень. Максимальная скорость ветра составляет 2 м/с, что является характерной величиной для бризов. По данным самолетных и наземных измерений в Сибири (Струнин, 2006) бриз развивается лишь в том случае, если размер водного объекта превышает некоторую характерную величину – около 10 км.

Оценка точности агрегирования турбулентных потоков мозаичным методом в зависимости от влажности почвы и скорости синоптического потока дала результаты, аналогичные описанным выше. Можно сделать, таким образом, вывод, что мозаичный подход оказался применимым для широкого интервала синоптических условий и характеристик подстилающей поверхности суши.

Выводы. Региональная атмосферная модель, развиваемая в НИВЦ МГУ совместно с ИВМ РАН, реализована на гибридных многопроцессорных многоядерных вычислительных системах. С этой целью использована двумерная декомпозиция расчетной области и явная передача сообщений по стандарту MPI. На примере решения уравнений движения показана высокая эффективность программы, в частности, продемонстрировано суперлинейное ускорение на суперкомпьютере СКИФ-МГУ «Чебышев». Вместе с тем, возможности обменных сетей традиционных кластерных систем не позволяют эффективно реализовывать параллельные алгоритмы со значительной долей обменов данными. В частности, использование быстрого преобразования Фурье в региональной модели приводит к «насыщению» ускорения модели на нескольких сотнях процессоров. По этой причине перспективность пета- и эксафлопных вычислений существенно зависит от возможности выбора численных алгоритмов с меньшей зависимостью по данным и суперкомпьютерных архитектур с большей плотностью вычислительных элементов в узле (многоядерность, сопроцессоры и ускорители, графические процессоры, Cell) и быстрой оперативной памятью.

Численные эксперименты показали, что мезомасштабная модель достаточно правдоподобно воспроизводит бризовые циркуляции, возникающие как над отдельным крупным озером, так и над территорией, покрытой множеством более мелких водоемов. Продemonстрировано также, что мозаичный метод агрегирования турбулентных потоков по большой территории дает хорошее совпадение с результатами прямого осреднения потоков, вычисленных в мезомасштабной модели. Причем это соответствие максимально для сильного синоптического потока (10 м/с); наибольшие же расхождения (10% от значения потока) были получены в случае интенсивной мезомасштабной циркуляции. Интенсивная мезомасштабная циркуляция, с максимальной скоростью ветра в приземном слое 7 м/с, развивалась в численном эксперименте с низкой влажностью почвы (20%) в отсутствие синоптического ветра. Таким образом, показано, что общепринятый мозаичный подход к оценке осредненных по большой территории турбулентных потоков дает вполне удовлетворительные результаты в случае сильной термической неоднородности, вызванной наличием гидрологических объектов различной конфигурации.

5.4. Моделирование климата и его изменений

Одна из основных проблем современной науки состоит в оценке будущих изменений климата и их последствий для окружающей среды. Наиболее перспективным средством получения таких оценок являются математические модели климатической системы, которые включают описание широкого круга физических, химических и биологических процессов, происходящих в атмосфере, гидросфере, криосфере и биосфере. В качестве основного математического аппарата в этих моделях используются уравнения гидромеханики и термодинамики сплошных и пористых сред при определенном уровне упрощающих предположений (см. главу 1). Для сравнения климатических моделей между собой и для определения путей их дальнейшего развития организованы международные проекты, в которых Россия представлена моделью Института вычислительной математики (ИВМ) РАН (Дымников и др., 2005). С этой моделью (разрешение атмосферного блока: 2.5° – по долготе, 2° – по широте, 21 уровень – по вертикали до высоты 30 км, 272160 узлов конечно-разностной сетки; разрешение океанского блока: 1° – по долготе, 0.5° – по широте, 40 горизонтов, 3425600 сеточных узлов) проведены многочисленные расчеты изменений климата в XXI веке при различных сценариях антропогенной эмиссии парниковых газов в атмосферу. Результаты этих расчетов были использованы при подготовке 4-го отчета Межправительственной группы экспертов по изменению климата (IPCC, 2007). Важной особенностью данной модели является подробное описание процессов в деятельном слое суши в условиях вечной мерзлоты, что существенно при оценке ее отклика на происходящее потепление нижней атмосферы.

Основные уравнения гидротермодинамики климатической системы. Принимая в качестве вертикальной координаты давление, нормированное к его значению на поверхности Земли, и используя гидростатическое приближение, система нелинейных уравнений гидротермодинамики атмосферы может быть записана в сферической системе координат в следующей форме (Дымников и др., 2005, см. также раздел 1.3):

$$\frac{du}{dt} - \left(f + \frac{u}{a} \operatorname{tg} \varphi \right) v + \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} + \frac{RT}{p_s} \frac{\partial p_s}{\partial \lambda} \right) = F_u, \quad (5.4.1)$$

$$\frac{dv}{dt} + \left(f + \frac{u}{a} \operatorname{tg} \varphi \right) u + \frac{1}{a} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} + \frac{RT}{p_s} \frac{\partial p_s}{\partial \varphi} \right) = F_v, \quad (5.4.2)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} = -\frac{RT}{\sigma}, \quad (5.4.3)$$

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial p_s u}{\partial \lambda} + \frac{\partial p_s v \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial p_s \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = 0, \quad (5.4.4)$$

$$\frac{dT}{dt} - \frac{RT}{c_p \sigma p_s} \left[p_s \dot{\sigma} + \sigma \left(\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{u}{a \cos \varphi} \frac{\partial p_s}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial p_s}{\partial \varphi} \right) \right] = F_T + \varepsilon, \quad (5.4.5)$$

$$\frac{dq}{dt} = F_q - (C - E), \quad (5.4.6)$$

где F_u и F_v – скорости изменения импульса за счет напряжений Рейнольдса; F_T и F_q – слагаемые, описывающие процессы мелкомасштабной диффузии тепла и влаги; ε – неадиабатические притоки тепла ($\varepsilon = \varepsilon_r + \varepsilon_f$; ε_r – радиационный приток тепла, ε_f – фазовый); C и E – члены, описывающие процессы конденсации и испарения влаги, соответственно. Уравнения движения (5.4.1) и (5.4.2) могут быть также записаны в форме Громеки-Лэмба (Алексеев и др., 1998):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \dot{\sigma} \frac{\partial u}{\partial \sigma} - Q p_s v + \frac{1}{a \cos \varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\Phi + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) + \frac{RT}{p_s} \frac{\partial p_s}{\partial \lambda} \right] &= F_u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \dot{\sigma} \frac{\partial v}{\partial \sigma} + Q p_s u + \frac{1}{a} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\Phi + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) + \frac{RT}{p_s} \frac{\partial p_s}{\partial \varphi} \right] &= F_v, \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

где

$$Q = \frac{1}{p_s} \left[f + \frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial v}{\partial \lambda} - \frac{\partial u \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) \right].$$

Слагаемые, записанные в правой части уравнений (5.4.1) – (5.4.6), возникают в результате реализации процедуры замыкания и отражают эффекты процессов подсеточных масштабов.

В качестве краевых условий для этой системы уравнений предполагается периодичность решения по долготе, а также условие ограниченности решения на полюсах. Подстилающая поверхность как твердое тело одновременно является σ -координатной поверхностью ($\sigma = 1$). Соответствующее кинематическое условие записывается в виде:

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 1. \quad (5.4.8)$$

Аналогичное условие ставится на верхней границе атмосферы ($p = 0$):

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 0. \quad (5.4.9)$$

При $\sigma = 1$, кроме условия (5.4.8), задается также распределение геопотенциала

$$\Phi = \Phi_s = gz_s \quad \text{при} \quad \sigma = 1, \quad (5.4.10)$$

где z_s – превышение земной поверхности над уровнем моря. В качестве краевых условий предполагается периодичность решения по долготе λ и его ограниченность на полюсах $\varphi = \pm \pi / 2$.

Уравнения гидротермодинамики океана в сферической σ -системе координат в приближении Буссинеска, гидростатики и "твердой" крышки могут быть записаны следующим образом (Алексеев и Залесный, 1984):

$$\frac{du}{dt} - \left(f + \frac{u}{a} \operatorname{tg} \varphi \right) v + \frac{1}{a \rho_0 \cos \varphi} \left(\frac{\partial p}{\partial \lambda} - \frac{\sigma}{H} \frac{\partial H}{\partial \lambda} \frac{\partial p}{\partial \sigma} \right) = F_u, \quad (5.4.11)$$

$$\frac{dv}{dt} + \left(f + \frac{u}{a} \operatorname{tg} \varphi \right) u + \frac{1}{a \rho_0} \left(\frac{\partial p}{\partial \varphi} - \frac{\sigma}{H} \frac{\partial H}{\partial \varphi} \frac{\partial p}{\partial \sigma} \right) = F_v, \quad (5.4.12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \sigma} = gH \rho', \quad (5.4.13)$$

$$\frac{1}{a \cos \varphi} \left(\frac{\partial Hu}{\partial \lambda} + \frac{\partial Hv \cos \varphi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} = 0, \quad (5.4.14)$$

$$\frac{dT}{dt} = F_T, \quad \frac{dS}{dt} = F_S, \quad (5.4.15)$$

$$\rho' = \rho(T, S, p) - \rho_0, \quad (5.4.16)$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{u}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\dot{\sigma}}{H} \frac{\partial}{\partial \sigma}.$$

Здесь $\sigma = z / H$; z – глубина, отсчитываемая от невозмущенного уровня океана, $H(\lambda, \varphi)$ – рельеф дна океана (предполагается, что $0 < H_{\min} \leq H \leq H_{\max}$); $u, v, \dot{\sigma}$ – компоненты вектора скорости течения вдоль долготы, широты и вертикальной координаты, соответственно; T, S, p, ρ' – температура, соленость, давление и отклонение плотности от значения $\rho_0 = 1200 \text{ кг/м}^3$ (при этом $\rho(T, S, p)$ – известная нелинейная функциональная зависимость, определяющая состояние морской воды, в том числе – ее сжатие с увеличением глубины); слагаемые F_u, F_v, F_T и F_S в правой части уравнений (5.4.11) – (5.4.15) имеют тот же самый смысл, что и соответствующие члены в правой части уравнений атмосферной циркуляции (5.4.1) – (5.4.6), и ответственны за параметризацию процессов турбулентной диссипации и турбулентного обмена теплом и солью. Система (5.4.11) – (5.4.15) записана для цилиндрической неодносвязной области, ограниченной сверху невозмущенной поверхностью океана ($\sigma = 0$), а снизу – его дном ($\sigma = 1$). Краевые условия для аналога вертикальной скорости $\dot{\sigma}$ на этих горизонтах имеют вид (5.4.8), (5.4.9).

Модельная область охватывает весь Мировой океан, простираясь по широте от берегов Антарктиды до 89° с.ш. Эта область включает в себя также следующие "острова": Австралию, Антарктиду, Исландию, Кубу, Мадагаскар, Новую Зеландию, Шпицберген и Японию. Приближение "твердой крышки" (5.4.8) позволяет ввести функцию тока для плоской (баротропной) циркуляции океана. На твердых границах Евразии, Африки, Северной и Южной Америки, объединенных в один континент, задается нулевое значение функции тока. На контурах вышеназванных островов значения функции тока рассчитываются по методу, изложенному в работе (Марчук и др., 1987). Для бароклинических составляющих скорости на твердых границах (в том числе, и на дне) ставится условие прилипания, а для температуры и солености принимаются условия отсутствия их потоков. На границе раздела "атмосфера - океан" записываются условия теплового и водного баланса, а вертикальные потоки импульса считаются непрерывными.

При интегрировании климатической модели на длительный срок необходимо также рассчитывать сток больших рек, влияющих на распределение солености в акваториях, близких к местам впадения этих рек. С этой целью на границах раздела рек и соответствующих акваторий можно задать (как, например, в модели ИВМ РАН) значения солености в соответствии с данными из атласа Левитуса (Levitus, 1994). Таким способом учитываются стоки основных сибирских рек (Енисей, Лена и Обь), а также Амазонки, Брахмапутры, Ганга и Инда. Кроме того, аналогичным образом параметризуется влияние Красного моря и Персидского залива на распределение солености в Аравийском море. В океаническом блоке климатической модели реализован также расчет эволюции морского льда, позволяющий реалистично описать сезонную изменчивость ледового покрова в Арктике и Южном океане.

Как уже отмечалось, слагаемые, записанные в правой части уравнений гидротермодинамики атмосферы и океана, возникают в результате реализации процедуры замыкания и отражают эффекты процессов подсеточных масштабов, к которым относятся, например, турбулентность в пограничном слое атмосферы, в верхнем и придонном слоях океана, конвекция и орографические волны в атмосфере. Расчет неадиабатических источников тепла, связанных с радиационными и фазовыми процессами, облачности и осадков также связан с необходимостью разработки параметризации соответствующих физических процессов. Наконец, во внимание должны быть приняты такие процессы как цикл углерода и метана, фотохимические трансформации, тепловлагоперенос в почве, растительном и снежном покрове, внутренних водоемах и т.п. Основные идеи, используемые при параметризации процессов подсеточных масштабов, изложены в главе 2. Здесь же целесообразно остановиться несколько подробнее на проблеме параметризации горизонтальной диффузии.

Скорости изменения импульса, температуры и удельной влажности (солености), обусловленные подсеточной турбулентностью, можно представить в виде суммы:

$$F_{\psi} = F_{\psi}^h + F_{\psi}^v,$$

где ψ – любая из переменных u , v , T , q или S , а верхними индексами h и v обозначены вклады горизонтальной диффузии и вертикального перемешивания, соответственно. При описании турбулентной горизонтальной диффузии целесообразно потребовать выполнения двух условий: 1) соответствующее слагаемое в уравнениях должно обеспечивать интегральную диссипацию энергии; 2) глобальный угловой момент системы должен сохраняться. Вывод такого замыкания, в основе которого лежат идеи теории двумерной турбулентности (Kraichnan, 1959) и использование оператора Лапласа, приведен в монографии (Марчук и др., 1984).

Однако, выбор того или иного замыкания для описания эффектов подсеточной горизонтальной диффузии в конкретной модели в значительной степени зависит от

"согласованности" всех ее блоков (Дымников и др., 2005). Ошибки, возникающие при воспроизведении каких-либо физических процессов и обусловленные как недостаточным их знанием или чересчур упрощенным описанием, так и имеющие вычислительный характер, могут приводить в конечном итоге к ложному каскаду энергии в коротковолновой части ее спектра. Для воспроизведения нелинейных по своей природе колебаний в климатической системе (в первую очередь, в атмосфере) необходимо правильно воспроизвести не только уровень генерации вихревой кинетической энергии (и цикл преобразований энергии в целом), но и перераспределение этой энергии по спектру. Использование в этом случае замыканий и с оператором Лапласа может оказаться не эффективным для подавления избыточного накопления энергии в коротких масштабах.

Так, например, в работе (Алексеев и др., 1998) для описания горизонтальной диффузии использован оператор типа бигармонического. Вводится оператор Δ_{μ}

$$\Delta_{\mu}\psi = \frac{1}{a^2 \cos^2 \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} + \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \mu \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right),$$

где $\mu(\lambda, \varphi)$ – коэффициент горизонтальной диффузии. Обозначив через Δ_1 оператор Δ_{μ} с тождественно единичным коэффициентом μ , соответствующее замыкание для импульса можно записать в виде

$$F_{(u,v)}^h = -\Delta_{\mu} \Delta_1(u, v).$$

Здесь оператор горизонтальной диффузии используется для описания этого процесса вдоль поверхностей $\sigma = \text{const}$. Экспериментальным путем было установлено, что для температуры и влажности более адекватной оказалась диффузия вдоль поверхностей равного давления. Соответствующее замыкание имеет вид

$$F_{(T,q)}^h = -\Delta_{\mu} \Delta_p(T, q),$$

где

$$\Delta_p \psi = \Delta_1 \psi - \frac{\partial \psi}{\partial \ln \sigma} \Delta_1 p_s,$$

т.е. учтена поправка, связанная с несовпадением σ - и p -поверхностей.

При моделировании общей циркуляции океана также используется диффузия четвертого порядка для составляющих скорости течений (Дианский и др., 2002). В то же время для скалярной субстанции ψ (температуры и солёности) оказалось предпочтительным применение диффузии второго порядка, представляющей собой точную форму преобразования оператора горизонтальной диффузии из z - в σ -систему координат.

Численная реализация. В климатической модели использованы конечно-разностные аппроксимации дифференциальной системы уравнений динамики атмосферы, которые выполнены на сетке C (Arakawa, 1972). В конечно-разностной схеме выполняется закон сохранения массы, а также (при отсутствии диссипации и источников) полной энергии и (в приближении "мелкой воды") энтропии. Применяется полунейная схема интегрирования по времени (Robert et al., 1972) с фильтром (Asselin, 1972). При этом на каждом шаге по времени решается уравнение, являющееся дискретным аналогом уравнения Гельмгольца. Вблизи полюсов (начиная с 69° Северного и Южного полушарий)

применяется Фурье-фильтрация высокочастотных гармоник вдоль круга широты для всех прогностических переменных.

При численной реализации океанского блока климатической модели применен метод расщепления (Марчук, 1967) по физическим процессам и пространственным координатам, что позволяет эффективно реализовывать неявные методы интегрирования по времени. В разных версиях модели океана используются разнесенные пространственные аппроксимации на сетке B или C . Метод расщепления позволяет вводить функцию тока только на промежуточном этапе расщепления (геострофического приспособления), на котором уравнение для функции тока является линейным (Алексеев и Залесный, 1984). Следует отметить важную роль подходящего выбора сетки для правильного воспроизведения океанической циркуляции. Так например, по сравнению с сеткой B переход при численной реализации на сетку C , обладающей меньшей диссипативностью, позволил существенно уменьшить коэффициент горизонтальной диффузии, а также более адекватно аппроксимировать расчетную область в проливах и точнее описать обмен солью между Атлантикой и Средиземным морем через Гибралтар, что очень важно для описания термохалинной циркуляции в Северной Атлантике.

Обмен информацией между моделями атмосферы и океана происходит каждые несколько часов модельного времени. Этот промежуток времени служит и численным шагом модели океана. Он может меняться в зависимости от цели численного эксперимента. Внутри этого периода накапливаются, а затем осредняются, потоки явного и скрытого тепла, пресной воды, импульса, суммарные (приходящие и уходящие) потоки длинноволновой и коротковолновой радиации, рассчитываемые моделью атмосферы на поверхности океана. Эти потоки служат атмосферным воздействием для модели океана. При этом 60% суммарной коротковолновой солнечной радиации добавляется к потоку тепла на поверхности океана, представляющего собой сумму потоков явного, скрытого тепла и суммарной длинноволновой радиации. Остальная часть коротковолновой солнечной радиации имеет проникающую природу с экспоненциальным затуханием по глубине и описывается в модели особо. Такой способ учета коротковолновой радиации является упрощением известных моделей поглощения коротковолновой радиации в океане (см., например, Jerlov, 1968).

Поскольку в моделях атмосферы и океана может использоваться разное пространственное разрешение, необходимо пересчитывать параметры атмосферного воздействия на горизонтальную сетку модели океана. Этот пересчет осуществляется с помощью линейной интерполяции. При расчете потоков на поверхности океана в модели атмосферы температурой поверхности океана (ТПО) считается температура самого верхнего расчетного уровня океанической модели. Так как пространственная океаническая сетка мельче атмосферной, то для пересчета ТПО на атмосферную сетку можно использовать процедуру пространственного весового осреднения. Она заключается в том, что ТПО во всех узлах океанической сетки, попадающих в ячейку атмосферной сетки, берутся с весом, пропорциональным площади пересечения соответствующей океанической ячейки с ячейкой атмосферной сетки.

Уравнения климатической модели могут быть записаны в общем виде следующим образом

$$\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} + A\vec{\phi} + B\vec{\phi} = \vec{F}, \quad (5.4.17)$$

где $\vec{\phi}$ – вектор состояния системы, A – оператор, отвечающий за трехмерную адвекцию и горизонтальную диффузию, оператор B представляет градиент давления и силу Кориолиса, а вектор правых частей $\vec{F}$ ответственен за источники и стоки вследствие физических процессов подсеточного масштаба (вертикальный турбулентный перенос, орографические и неорографические гравитационные волны, конвекция, радиация и др.).

Оператор $A + B$ представляет собой динамические, существенно трехмерные, процессы («динамический» блок модели).

Главное затруднение в распараллеливании атмосферной модели связано с алгоритмом интегрирования по времени дискретизированной системы уравнений (5.4.17). Это вызвано тем, что в модели используется полунейный алгоритм для быстрых гравитационных волн. В результате на каждом шаге по времени необходимо решать двумерные уравнения типа Гельмгольца на сфере. Параллельная реализация прямого алгоритма для решения этой задачи строится следующим образом. Система (5.4.17) без правых частей может быть записана в следующем разностном виде

$$\frac{\bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{1}{2}(L\bar{\varphi}^{n+1} + L\bar{\varphi}^{n-1}) + N\bar{\varphi}^n = 0, \quad (5.4.18)$$

где L – линейная часть оператора B из уравнения (5.4.17), ответственная за быстрые гравитационные волны, $N = B - L$, $(\dots)^{n+1}$ – значение элементов соответствующего уравнения на новом шаге времени, $(\dots)^n$ и $(\dots)^{n-1}$ – значения на текущем и предыдущем шагах по времени, соответственно. Неявная часть системы (5.4.18) сводится к одному дискретному трехмерному уравнению типа Гельмгольца относительно переменной D :

$$D^{n+1} - (\Delta t)^2 G \nabla^2 D^{n+1} = R, \quad (5.4.19)$$

где D – горизонтальная дивергенция на σ -поверхности, G – некоторая матрица, ∇^2 – дискретный аналог горизонтального оператора Лапласа в сферических координатах, а R объединяет все известные слагаемые системы (5.4.18) на уровнях времени $n-1$ и n . Диагонализирующее преобразование, примененное к матрице G , позволяет расщепить (5.4.19) в вертикальном направлении и решать это уравнение независимо для каждого вертикального уровня прямым методом, основанном на быстром преобразовании Фурье по долготе и решении трехдиагональных линейных систем по широте.

Аналогичная проблема возникает при реализации модели общей циркуляции океана. Ее интегрирование по времени проводится методом расщепления, в котором можно выделить следующие физические (и связанные с ними вычислительные) процессы: перенос-диффузия для температуры и солёности, перенос – диффузия для компонент скорости течения, адаптация гидрологических полей. Параллельная реализация вычислительных процессов для переноса-диффузии не вызывает особых затруднений (используется явная схема Адамса-Бэшфорта для переноса и горизонтальной диффузии и неявная схема – для вертикальной диффузии). Однако, для решения задачи (баротропной) адаптации применяется полностью неявная схема, в результате применения которой возникает система линейных уравнений с плохо обусловленной 7-диагональной несимметричной матрицей, для обращения которой можно использовать современные эффективные пакеты, например, PETSc (Balay et al., 2009).

Распараллеливание. Моделирование климата является проблемой, которая требует огромных вычислительных ресурсов, доступных только при использовании высокопроизводительных параллельных компьютеров. При этом программная реализация модели должна учитывать особенности параллельной архитектуры этих компьютеров. В настоящее время в основном используются параллельные вычислительные системы с распределенной памятью, организованные как вычислительные узлы, соединенные высокопроизводительной сетью. Необходимость такой сети диктуется особенностями используемых алгоритмов (например, полунейная схема интегрирования по времени). Вычислительные узлы применяемых систем основаны либо на специализированных (как правило, векторных) высокопроизводительных процессорах, либо на многопроцессорных

блоках (2 – 32 процессора). Многопроцессорный блок при этом работает на общей памяти.

Программный код климатической модели ИВМ РАН разработан на языке Фортран. Параллельная версия модели общей циркуляции атмосферы была реализована на системе МВС1000М (Межведомственный суперкомпьютерный центр), SCI-кластере НИВЦ МГУ и на других вычислительных системах параллельной архитектуры (Tolstykh and Gloukhov, 2002, Глухов, 2003). Для организации обменов данными между процессорами используется стандарт MPI. Применяется подход "одна программа – много данных" (SPMD), где головной процесс также организует ввод/вывод и некоторые дополнительные вычисления. Аналогичный подход использован и для разработки параллельной версии модели общей циркуляции Мирового океана (Терехов, 2010, Terekhov et al., 2011).

Общее ускорение вычислительных процедур модели при разрешении пространственной сетки $2^\circ \times 2.5^\circ$ по горизонтали и 21 уровень по вертикали на 128 процессорах вычислительной системы МВС1000М составило 31 раз, а на 36 процессорах SCI-кластера НИВЦ МГУ – 15. Время расчета климата на один месяц модельного времени на вычислительной системе МВС1000М уменьшилось с 5 часов 14 минут на одном процессоре до 15 минут 20 секунд на 64 процессорах. Следует заметить, однако, что в дальнейших экспериментах с совместной моделью общей циркуляции атмосферы и океана ее океанский блок рассчитывался на одном процессоре, что может быть оправдано лишь при использовании грубого разрешения.

Дальнейшее развитие параллельного кода климатической модели было связано с распараллеливанием ее океанского блока (Терехов, 2010, Terekhov et al., 2011). Модель общей циркуляции океана была реализована с использованием метода декомпозиции расчетной области в двух вариантах: на основе технологии MPI и гибридной технологии MPI+Open MP. В первом случае технология тестировалась на суперкомпьютере IBM BlueGene/P (использовалось до 128 процессоров с 4 ядрами), во втором – на кластере SGI Altix 1300 (использовалось до десяти 8-ядерных процессоров). При использовании гибридного режима уменьшается процессорная сетка, на которую проецируются массивы данных, и часть ядер используется для одновременных расчетов в циклах. Это позволяет уменьшить время пересылок между процессорами, но при этом понижается эффективность параллелизации. В тестах оценивалось время расчета полного шага модели. Оказалось, что на кластере SGI это время составило 9.8 сек при использовании только 8 ядер и только в режиме OpenMP. В случае общего числа использованных ядер 80 с 16 ядрами на OpenMP это время равнялось 1.8 сек. На суперкомпьютере Blue Gene/P время расчета полного шага модели составило 2.9 сек на 128 ядрах и 1.9 сек на 512. Использование метода декомпозиции позволило не только ускорить вычисления, но и уменьшить объем используемой памяти. Это, в свою очередь, дает возможность перейти на более мелкие сетки.

В настоящее время для проведения климатических исследований активно используется суперкомпьютер «Ломоносов». Модель A-2.5x2x80 общей циркуляции атмосферы разрешением 2.5° – по долготе, 2° – по широте и 80 уровней по вертикали (до 90 км) настроена для оптимального использования на 48 – 64 процессорных ядрах. При этом расчет на 3.3 модельных года с использованием 48 ядер занимает 1 сутки. Такое же время требуется для проведения расчетов на 3 года с совместной климатической моделью, включающей атмосферный (до высоты 30 км) блок A-1.25x1x21 (задействовано 128 ядер) и океанический блок O-0.5x0.25x40 (256 ядер).

Моделирование климата и его изменений. При моделировании глобального климата требуется воспроизвести широкий спектр его характеристик: сезонные и месячные средние, внутрисезонную изменчивость (муссонный цикл, параметры шторм-треков и т.п.), климатическую изменчивость (ее доминирующие моды, такие как явление Эль-Ниньо или Арктическое колебание) и др. К числу основных задач моделирования регионального климата следует отнести воспроизведение с высокой степенью

детализации его характеристик, исследование особенностей гидрологического цикла, оценку возможности экстремальных явлений, исследование последствий региональных климатических изменений для окружающей среды и социо-экономических отношений. В данном разделе рассматриваются (в качестве иллюстрации использования глобальных климатических моделей) некоторые из результатов работ (Володин и Дианский, 2006, Дымников и др., 2006), посвященных экспериментам с одним из вариантов климатической модели Института вычислительной математики РАН по воспроизведению изменений климата XX века и оценке возможных изменений климата в XXI – XXII веках. В России подобные эксперименты были проведены впервые.

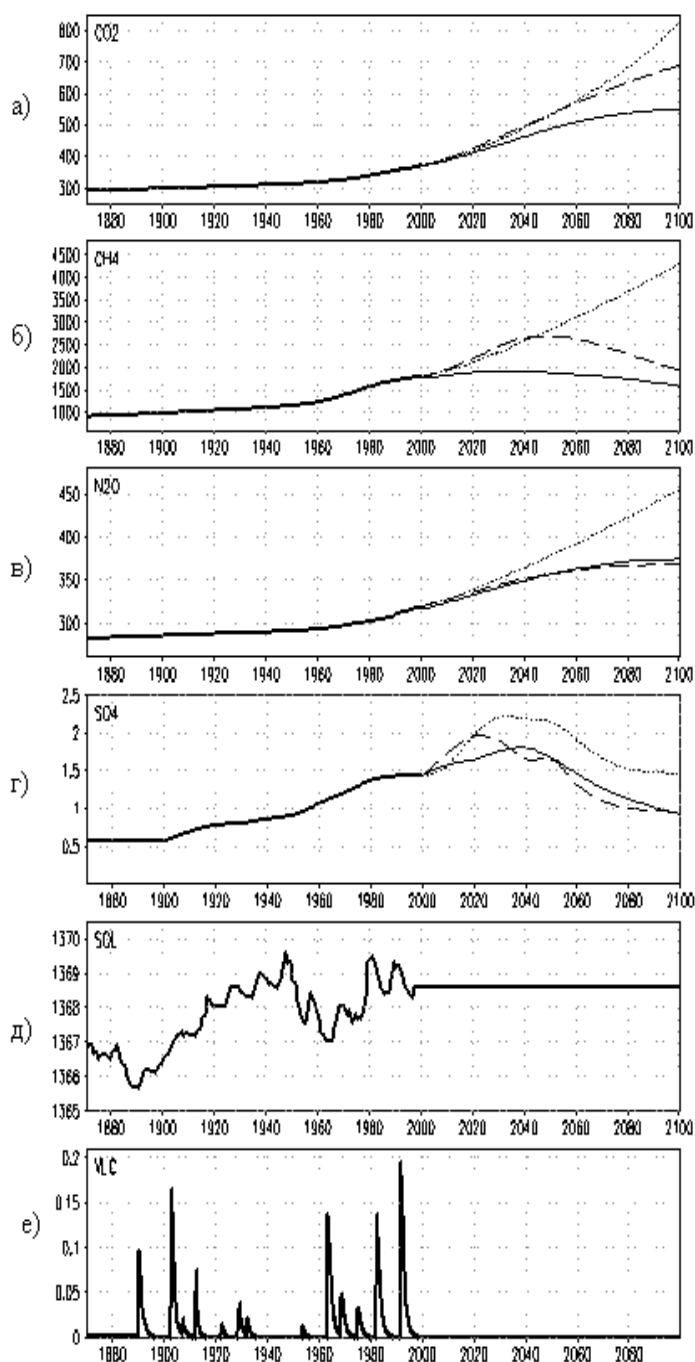


Рис. 5.4.1. Изменения содержания (а) углекислого газа (частей на миллион), (б) метана (частей на миллиард), (в) закиси азота (частей на миллиард), (г) интегрального сульфатного аэрозоля (мг/м^2), (д) солнечной постоянной (Вт/м^2) и (е) интегральной оптической толщины вулканического аэрозоля (безразм.) в эксперименте для XX века (жирная сплошная линия) и в экспериментах по сценариям B1 (тонкая сплошная линия), A1B (штриховая линия) и A2 (пунктирная линия).

В (IPCC, 2001) предложены сценарии изменения атмосферного содержания парниковых и других газов, обусловленные теми или иными социо-технологическими решениями. Среди такого рода сценариев можно отметить следующие: мир с быстро растущей экономикой, низким ростом населения и внедрением новых, более эффективных, технологий (сценарий A1); неоднородный мир с быстрым ростом популяции, но экономический рост и смена технологий происходят медленнее, чем по другим сценариям (A2); мир с низким ростом популяции, быстрыми изменениями в информационных потоках и экономике, соответствующим чистым технологиям и меньшим нагрузкам на природные ресурсы (B1); мир, базирующийся на локальных решениях глобальных проблем, с умеренным ростом популяции, промежуточным уровнем экономического развития и более диверсифицированными технологическими изменениями по сравнению со сценариями A1 и B1 (B2); мир с умеренным использованием ресурсов и сбалансированным использованием технологий (A1B).

В эксперименте по воспроизведению климата XX века задавался реальный временной ход изменения концентрации в атмосфере углекислого газа (CO_2), метана (CH_4) и закиси азота (N_2O) – основных парниковых газов, связанных с антропогенной деятельностью. Предполагалось, что эти газы хорошо перемешаны, а их концентрация не зависит от пространственных координат. Кроме того, были заданы наблюдавшиеся изменения во времени долготно-широтного содержания сульфатного аэрозоля, меридионального распределения оптической толщины вулканического аэрозоля, а также солнечной постоянной. Все эти данные доступны из Интернета (http://www-pcmdi.llnl.gov/ipcc.climate_forcing.php). Продолжительность данного эксперимента составляла 130 лет (1871 г. – 2000 г.). Был также проведен контрольный эксперимент, в котором содержание всех атмосферных составляющих не менялось во времени и соответствовало условиям 1871 г.

В экспериментах по моделированию климата XXI – XXII веков содержание углекислого газа, метана, закиси азота и сульфатного аэрозоля в XXI веке соответствовало отмеченным выше сценариям A1B, A2 и B1. Солнечная постоянная и содержание вулканических аэрозолей были заданы постоянными, наблюдавшимися в 2000 г. В течение XXII века содержание всех газовых составляющих соответствовало 2100 году. Продолжительность каждого из этих экспериментов составляла 200 лет. Временной ход всех использовавшихся внешних воздействий, а также содержание углекислого газа, метана, закиси азота и сульфатного аэрозоля в XXI веке по различным сценариям, изображены на рис. 5.4.1.

На рис. 5.4.2 представлен временной ход интегральной (глобально осредненной) температуры воздуха у поверхности в контрольном эксперименте, а также в экспериментах, моделирующих климат 20 – 22 столетий. В эксперименте, моделирующем климат XX века, уже к середине века заметно потепление по сравнению с контрольным экспериментом. К концу века повышение температуры достигает 0.7 – 0.8 градуса, что близко к наблюдаемому потеплению, которое составляет около 0.6 – 0.7 градуса. В данных контрольного эксперимента отсутствует такой временной интервал, в течение которого потепление было бы столь же существенно. Это означает, что наблюдающееся в XX веке потепление, вероятнее всего, обусловлено не внутренней изменчивостью системы атмосфера - океан, а внешними по отношению к ней воздействиями.

Если сравнить временной ход разности между глобально осредненной температурой в эксперименте по воспроизведению климата XX века и в контрольном эксперименте с оценкой изменения температуры в 1871 – 2000 гг. по данным наблюдений (рис. 5.4.3), то нетрудно убедиться, что модель хорошо воспроизводит такие особенности, как потепление в 1940 – 1950 гг., а также замедление потепления в 1960 – 1970 гг. Возможно, что причина этих особенностей обусловлена наличием максимума солнечной постоянной и минимума вулканических аэрозолей в 1940 – 1950 гг., а также минимума солнечной активности и максимума вулканических аэрозолей в 1960 – 1970 гг.

(рис. 5.4.2). Вместе с тем, нельзя и исключить, что, как следует из хода температуры в контрольном эксперименте (рис. 5.4.2), эти особенности могут быть связаны с естественной изменчивостью в климатической системе.

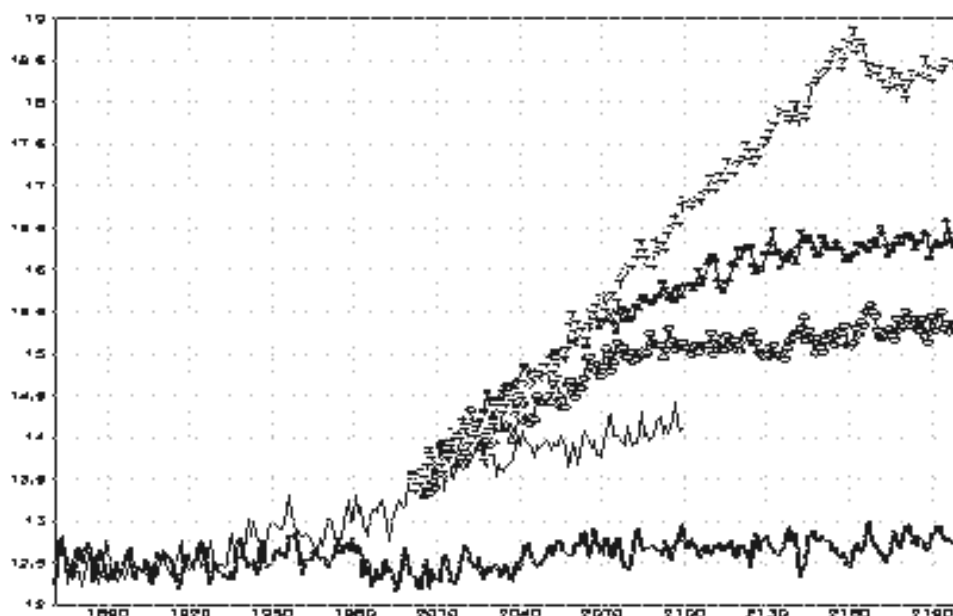


Рис. 5.4.2. Изменение интегральной температуры приземного воздуха, $^{\circ}\text{C}$ в контрольном эксперименте (пунктирная жирная линия), эксперименте для XX века (сплошная тонкая линия) и в экспериментах B1 (открытые кружочки), A1B (черные кружочки) и A2 (крестики). Сплошной жирной линией показано наблюдаемое изменение температуры.

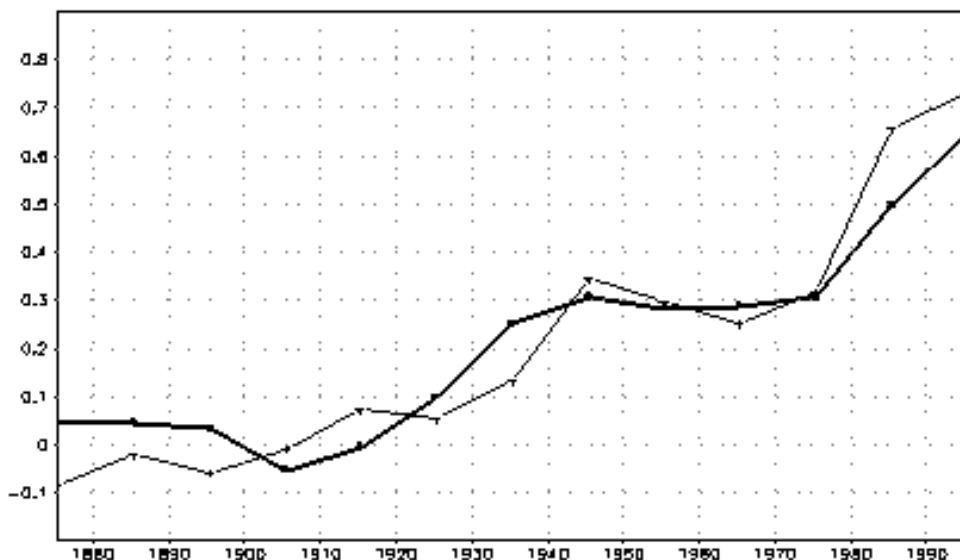


Рис. 5.4.3. Изменения глобально осредненной приземной температуры воздуха в 1871 – 2000 гг. по данным наблюдений (жирная линия) и разность, построенная по результатам воспроизведения климата XX века и контрольного эксперимента (тонкая линия). Данные осреднены за десятилетия.

На рис. 5.4.4 представлено географическое распределение рассчитанной (вверху) зимней приповерхностной температуры (климат 20 столетия) в сравнении с данными наблюдений (внизу). В целом, можно отметить довольно хорошее качество воспроизведения моделью современного климата.

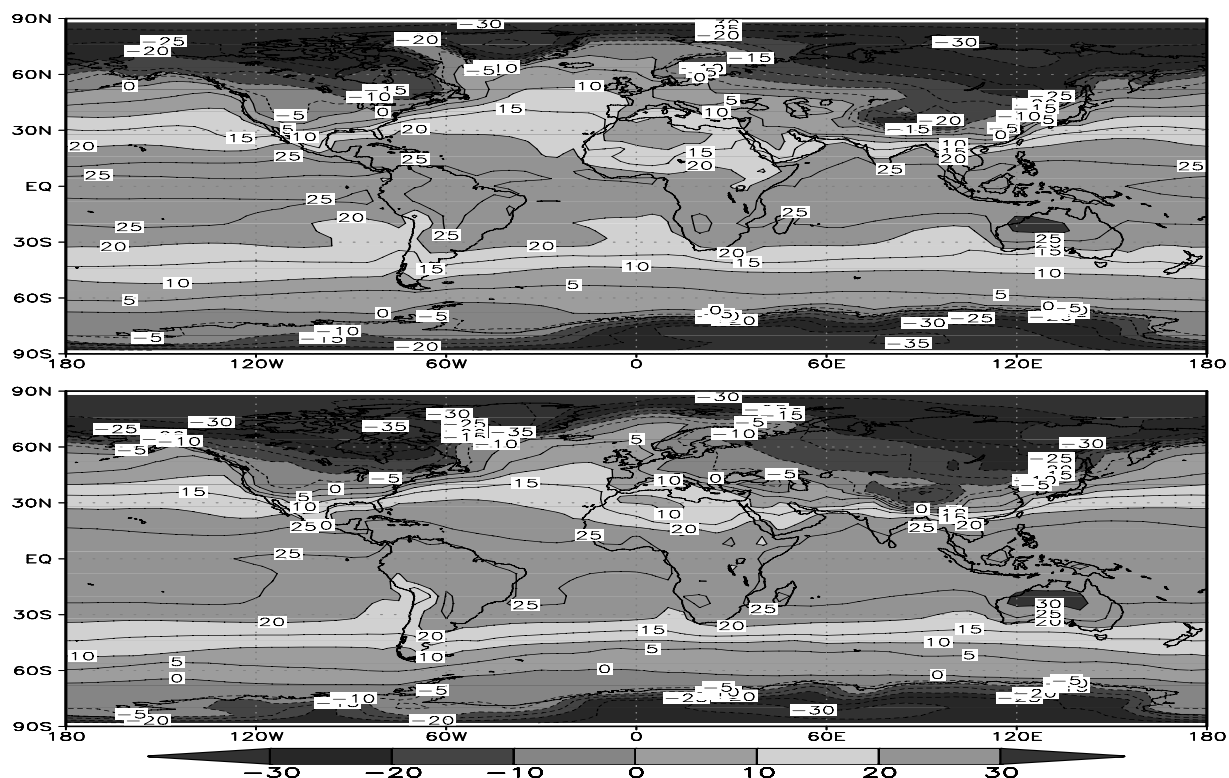


Рис. 5.4.4. Приповерхностная температура воздуха зимой (климат XX века): модельные расчеты (вверху) и наблюдения (внизу).

Изменение температуры при глобальном потеплении неоднородно по поверхности. Как показано в (Володин и Дианский, 2006), потепление максимально в Арктике и достигает там 10–12 К. На территории России (в частности, в Западной Сибири) повышение температуры составляет 5–7 К (см. рис. 5.4.5). В связи с этим следует ожидать существенных изменений в географическом распределении вечной мерзлоты (рис. 5.4.6).

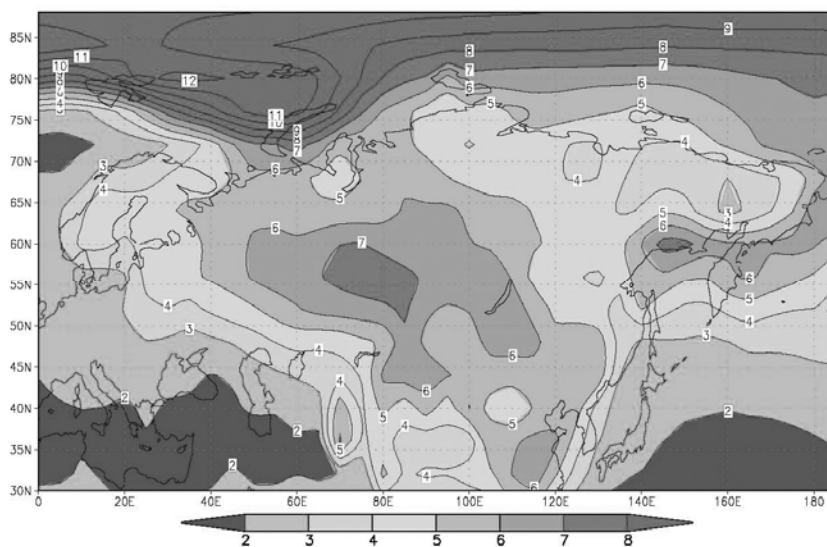


Рис. 5.4.5. Возможные изменения зимней температуры приземного воздуха в конце XXI века (осредненной за период 2081 – 2100 гг.) по сравнению с данными для конца XX века (осреднение за 1981 – 2000 гг.) по результатам модели Института вычислительной математики РАН для сценария A1B.

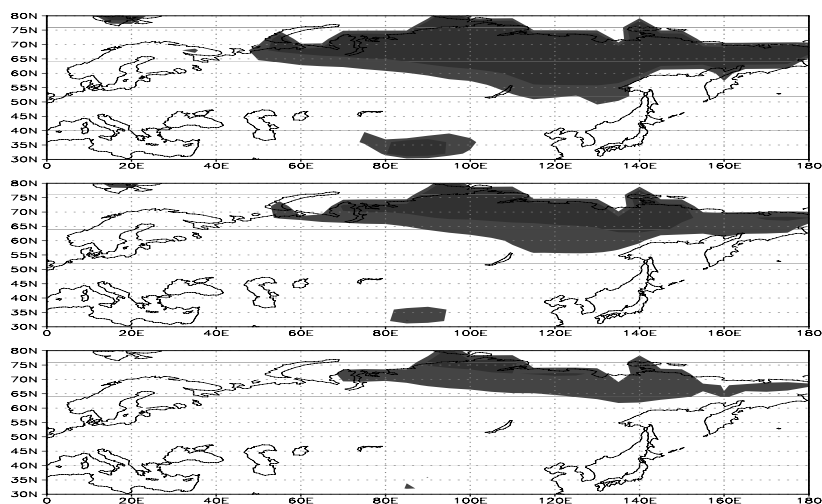


Рис. 5.4.6. Пространственное распределение вечной мерзлоты по данным численных экспериментов с климатической моделью ИВМ РАН: в 1981 – 2000 гг. (вверху), 2081 – 2100 гг. при сценарии В1 (в середине) и в 2081 – 2100 гг. при сценарии А2 (внизу).

На остальной части континентов температура повышается на 3 – 5 градусов. Слабее всего потепление выражено над тропическими океанами и Южным океаном (2 – 3 К). Такое распределение потепления по земному шару характерно для большинства моделей и близко к результатам, полученным осреднением данных всех моделей, участвовавших в программе СМIP. Рассчитанное изменение осадков при потеплении в модели ИВМ также типично для большинства моделей. Осадки возрастают в умеренных и высоких широтах обоих полушарий на 20 – 40%, а также над тропиками Тихого океана. На большей части субтропиков и над тропиками Атлантики осадки уменьшаются.

Выводы. Модель общей циркуляции атмосферы ИВМ РАН реализована на вычислительных системах с распределенной памятью с использованием MPI. Для ее распараллеливания использован метод двумерной декомпозиции расчетной области по широте и долготе. Для решения дискретного уравнения Гельмгольца, возникающего при применении полунейвной схемы интегрирования по времени, прямым методом, включающим преобразование Фурье вдоль долготы и трехдиагональные прогонки вдоль широты, данные транспонируются два раза: сначала в плоскости высота – долгота, затем – в плоскости широта – долгота. При вычислении производных методом конечных разностей и интерполяции значений горизонтальных компонент скорости в центральные точки ячеек смещенной C-сетки Аракавы процессы обмениваются значениями полей в граничных точках подобластей. Использование метода декомпозиции позволило не только распараллелить океанский блок модели и ускорить вычисления, но и уменьшить объем используемой памяти. Это, в свою очередь, дает возможность перейти на более мелкие сетки. Для проведения климатических исследований используется суперкомпьютер «Ломоносов». Расчет с помощью модели A-2.5x2x80 общей циркуляции атмосферы разрешением 2.5° – по долготе, 2° – по широте и 80 уровней по вертикали (до 90 км) на 3.3 модельных года с использованием 48 ядер занимает 1 сутки. Такое же время требуется для проведения расчетов на 3 года с совместной климатической моделью, включающей атмосферный (до высоты 30 км) блок A-1.25x1x21 (задействовано 128 ядер) и океанический блок O-0.5x0.25x40 (256 ядер). Это дает возможность проводить длительные (на несколько сотен лет модельного времени) численные эксперименты. Одна из версий климатической модели ИВМ РАН (Володин и др., 2010) используется для расчетов современных и возможных в будущем изменений климата, результаты которых будут использованы при подготовке 5-го отчета межправительственной группы экспертов по изменению климата, запланированного для публикации на 2013 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основными направлениями, по которым в настоящее время происходит совершенствование климатических моделей и методов прогноза погоды, являются повышение пространственного разрешения и совершенствование физических параметризаций процессов подсеточных масштабов. Уровень пространственного разрешения, и, в значительной степени, сложность физических параметризаций лимитируются производительностью наиболее мощных вычислительных систем (суперкомпьютеров). Так, пиковая производительность имеющихся в распоряжении разработчиков климатических моделей вычислительных комплексов (несколько сотен, в лучшем случае, тысяч триллионов арифметических операций в секунду) позволяет проводить длительные (на сотни лет) расчеты лишь на сетке с разрешением порядка 100 км. Это разрешение не позволяет оценивать эффекты изменения климата на региональном уровне, в то время как именно региональные различия в будущем климате представляют особенный интерес. Для получения региональных прогнозов широко используются мезомасштабные модели с разрешением 1 – 10 км и размером расчетной области от нескольких сотен до нескольких тысяч километров. Мезомасштабные модели упомянутого разрешения, в свою очередь, не способны явно воспроизводить структуру атмосферных течений с пространственным масштабом менее нескольких километров. Такие течения могут быть воспроизведены методом вихреразрешающего моделирования, который позволяет явно описать нестационарную динамику крупных трехмерных вихрей, вносящих основной вклад в энергию турбулентных потоков в пограничном слое атмосферы. Пространственное разрешение вихреразрешающих моделей пограничного слоя атмосферы, в зависимости от типа турбулентного течения, составляет от нескольких метров до нескольких десятков метров, а размеры расчетной области – до нескольких десятков километров.

В настоящее время все более широкое распространение получают петафлопсные (10^{15} арифметических операций в секунду) вычислительные системы, а в перспективе текущего десятилетия ожидается, что производительность суперкомпьютеров достигнет эксафлопного (10^{18} операций в секунду) уровня. В ближайшей перспективе глобальные атмосферные модели будут иметь разрешение, характерное для современных мезомасштабных моделей (1 – 10 км), а шаг сетки моделей, использующихся для прогноза и диагноза атмосферной циркуляции на региональном уровне, составит ~ 100 метров. Такое же разрешение (от 1 км до 100 м) будет доступным и для дискретизации уравнений гидротермодинамики по вертикальной координате. Опыт, полученный японскими исследователями в моделировании глобальных климатических процессов с горизонтальным разрешением от 3.5 до 10 км (Satoh et al., 2005), заложил основу для широкого экспериментирования с моделями очень высокого разрешения и привел к необходимости разработать стратегию дальнейшего развития климатических моделей с учетом перспектив высокопроизводительных вычислений (Shukla et al., 2009). Все большее внимание уделяется созданию «бесшовных» (с улучшенным локальным разрешением и физическим описанием) моделирующих систем, позволяющих в рамках единой вычислительной технологии воспроизвести как можно более широкий спектр атмосферных движений (см., например, Tao et al., 2009).

Рост мощности современных и будущих вычислительных систем сопровождается существенными изменениями в их архитектуре, в частности, переходом к массивно-параллельным компьютерам, что требует разработки хорошо масштабируемых вычислительных алгоритмов для использования на большом количестве процессорных ядер. Переход к высокому разрешению по всему Земному шару потребует отказа от равномерной сетки в широтно-долготной системе координат. Еще в начале 70-х годов прошлого века предпринимались попытки решить проблему полюсов в сферической системе координат, например, с помощью так называемого метода кубической сферы (Sadourny, 1972), базирующегося на неконформном отображении поверхности сферы на

границ куба. Глобальная модель совместной общей циркуляции атмосферы и океана, построенная на основе этого подхода, представлена в работе (Adcroft et al., 2004). В статье (Ringler et al., 2000) предложено использовать геодезическую сетку, которая получается рекурсивным разбиением граней правильного икосаэдра на четыре треугольника и последующим проектированием их вершин на поверхность сферы. Подробное обсуждение затронутых вопросов по сеткам можно найти в (Bonaventura et al., 2011).

Потребуется также пересмотр физических параметризаций. В первую очередь, это касается параметризации конвекции, поскольку конвекция начинает воспроизводиться явно при разрешениях несколько километров и менее. В настоящее время довольно широко используется подход, получивший название «суперпараметризация» (см., например, Grabowski, 2004), при котором в каждой вертикальной колонке, связанной с горизонтальной ячейкой крупномасштабной модели, явно воспроизводится двумерная (в вертикальном сечении) локальная и мезомасштабная динамика течений. Требуется своего внимания детализированное описание атмосферных процессов в пограничном слое над неоднородной поверхностью суши, а также русловых потоков в речной сети. Радиационные процессы тоже, по-видимому, нельзя больше рассматривать как локально одномерные. Таким образом, переход на более детальное разрешение не может быть осуществлен «механически» (только за счет отказа от гидростатического приближения), без существенной переработки существующих вычислительных технологий и, в некоторых случаях, переформулировки параметризаций и систем уравнений, используемых в настоящее время для приближенного описания гидротермодинамики климатической системы, а в перспективе – Земной системы. Это – одна из тех проблем, для успешного решения которой необходима подготовка высококвалифицированного научно-технического и кадрового потенциала, способного эффективно использовать современные и будущие суперкомпьютерные ресурсы.

Литература

1. *Алексеев В.А., Володин Е.М., Галин В.Я., Дымников В.П., Лыкосов В.Н.* Моделирование современного климата с помощью атмосферной модели ИВМ РАН. Описание модели A5421 версии 1997 года и результатов эксперимента по программе АМІР II. – Деп. ВИНТИ:03.07.98, No. 2086-B98. – 215 с.
2. *Алексеев В.В., Залесный В.Б.* Численная модель крупномасштабной динамики океана. – Вычислительные процессы и системы, М.: Наука. – 1984. – № 10. – С. 232–252.
3. *Алоян А.Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. – М.: Наука, 2008. – 416 с.
4. *Антонов А.С.* Параллельное программирование с использованием технологии MPI. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2004. – 71 с.
5. *Антонов А.С.* Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2009. – 77 с.
6. *Астраханцев Г.П.* Об одном итерационном методе. – ЖВМиМФ, 1971. – Т. 11 – С. 439–448.
7. *Бабенко К.И.* Основы численного анализа. – М.: Наука, 1986. – 744 с.
8. *Бахвалов Н.С.* О сходимости одного релаксационного метода для эллиптического оператора с естественными ограничениями. – ЖВМиМФ, 1966. – Т. 6 – С. 101–135.
9. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. – М.: Наука, 2003. – 630 с.
10. *Бенгтсон Л.* Прогнозы на средние сроки в Европейском центре прогнозов погоды на средние сроки (ЕЦППС). – В кн.: Динамика погоды. Л.: Гидрометеиздат, 1988. – С. 18–64.
11. *Бендат Дж., Пирсол А.* Измерение и анализ случайных процессов. – М.: Мир, 1974. – 464 с.
12. *Блинова Е.Н.* Гидротермодинамическая теория волн давления, температурных волн и центров действия. – Докл. АН СССР, 1943. – Т. 39. – С. 284–287.
13. *Болин Б.* Биогеохимические процессы и моделирование климата. – В кн.: Глобальный климат. Л.: Гидрометеиздат, 1987. – С. 456–479.
14. *Боресков А.В., Харламов А.А.* Основы работы с технологией CUDA. – ДМК Пресс, 2010. – 232 с.
15. *Будыко М.И.* Тепловой баланс поверхности Земли. – Л.: Гидрометеиздат, 1956. – 255 с.
16. *Бурман Э.А.* Местные ветры. – Л.: Гидрометеиздат. – 341 с.
17. *Ван-Дайк М.* Альбом течений жидкости и газа. – Пер. с английского Л.В. Соколовской под ред. Г.И. Баренблатта и В.П. Шидловского, М.: Мир, 1986. – 184 с. (электронная версия: http://www.imec.msu.ru/content/nio/VanDaik/vd_main.html).
18. *Василевский Ю.В., Ольшанский М.А.* Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции области. – М.: МГУ, 2007. – 103 с.
19. *Вельтищев Н.Ф., Степаненко В.М.* Мезометеорологические процессы. Учебное пособие. – М.: Географический факультет МГУ, 2007. – 127 с.
20. *Воеводин В.В.* Математические модели и методы в параллельных процессах. – М.: Наука, 1986. – 296 с.
21. *Воеводин В.В.* Математические основы параллельных вычислений. – М.: Изд-во МГУ, 1991. – 345 с.
22. *Воеводин В.В.* Вычислительная математика и структура алгоритмов. – М.: Изд-во МГУ, 2006. – 112 с.
23. *Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.* Параллельные вычисления. – СПб., БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.

24. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. – М.: Наука, 1984. – 318 с.
25. Володин Е.М., Дианский Н.А. Отклик совместной модели общей циркуляции атмосферы и океана на увеличение содержания углекислого газа. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2003. – Т. 39. – С. 193–210.
26. Володин Е.М., Дианский Н.А. Моделирование изменений климата в 20–22 столетиях с помощью совместной модели общей циркуляции атмосферы и океана. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2006. – Т. 42. – С. 291–306.
27. Володин Е.М., Дианский Н.А., Гусев А.В. Воспроизведение современного климата с помощью совместной модели общей циркуляции атмосферы и океана INMCM4.0. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2010. – Т. 46. – С. 448–466.
28. Володин Е.М., Лыкосов В.Н. Параметризация процессов тепло- и влагообмена в системе растительность-почва для моделирования общей циркуляции атмосферы. 1. Описание и расчеты с использованием локальных данных наблюдений. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 1998. – Т. 34. – С. 453–465.
29. Володина Е.Е., Бенгтссон Л., Лыкосов В.Н. Параметризация процессов тепловлагопереноса в снежном покрове для целей моделирования сезонных вариаций гидрологического цикла суши. – Метеорология и гидрология, 2000. – № 5. – С. 5–14.
30. Галёркин Б.Г. Стержни и пластинки. Ряды в некоторых вопросах упругого равновесия стержней и пластинок. – Вестник инженеров, 1915. – Т. 1. – С. 897–908.
31. Галин В.Я. Параметризация радиационных процессов в атмосферной модели ИВМ. – Изв. АН. Физика атмосферы и океана, 1998. – Т. 34. – С. 380–389.
32. Галин В.Я., Смышляев С.П., Володин Е.М. Совместная химико-климатическая модель атмосферы. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2007. – Т. 43. – С. 437–452.
33. Гельфонд О. Исчисление конечных разностей. – М.: ГИФМЛ, 1959. – 201 с.
34. Гетлинг А.В. Конвекция Рэлея-Бенара. Структуры и динамика. – Изд.-во: Эдиторал УРСС, Москва, 1999. – 249 с.
35. Глазунов А.В. Численное моделирование сдвиговой турбулентности с использованием параллельных вычислений на компьютерах с распределенной памятью. – Параллельные вычислительные технологии: Труды международной научной конференции (29 января - февраля 2007 г., г. Челябинск), Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. – Т. 2. – С. 179–192.
36. Глазунов А.В. Вихреразрешающее моделирование турбулентности с использованием смешанного динамического локализованного замыкания. Часть 1. Формулировка задачи, описание модели и диагностические численные тесты. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2009а. – Т. 45. – С. 7–28.
37. Глазунов А.В. Вихреразрешающее моделирование турбулентности с использованием смешанного динамического локализованного замыкания. Часть 2. Численные эксперименты; моделирование турбулентности в канале с шероховатыми границами. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2009б. – Т. 45. – С. 29–42.
38. Глазунов А.В. О влиянии направления геострофического ветра на турбулентность и квазиупорядоченные крупномасштабные структуры в пограничном слое атмосферы. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2010. – Т. 46. – С. 786–807.
39. Глазунов А.В., Дымников В.П. Пространственные спектры и характерные горизонтальные масштабы флуктуаций температуры и скорости в конвективном пограничном слое атмосферы. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2012 (в печати).
40. Глобус А.М. Экспериментальная гидрофизика почв. – Л.: Гидрометеиздат,

1969. – 355 с.
41. Глухов В.Н. Реализация моделей климата на многопроцессорных вычислительных системах кластерного типа. – Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н., М.: Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ, 2003. – 91 с.
 42. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
 43. Голицын Г.С. Динамика природных явлений. – М.: Физматлит, 2004. – 344 с.
 44. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М.: Наука, 1966. – 664 с.
 45. Дианский Н.А., Багно А.В., Залесный В.Б. Сигма-модель глобальной циркуляции океана и ее чувствительность к вариациям напряжения трения ветра. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2002. – Т. 38. – С. 537–556.
 46. Дианский Н.А., Володин Е.М. Воспроизведение современного климата с помощью совместной модели общей циркуляции атмосферы и океана. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2002. – Т. 38. – С. 824–840.
 47. Должанский Ф.В. Основы геофизической гидродинамики. – М.: Физматлит, 2011. – 264 с.
 48. Дородницын А.А., Извеков Б.И., Швец М.Е. Математическая теория общей циркуляции. – Метеорология и гидрология, 1939. – № 4. – С. 32–41.
 49. Дымников В.П. Устойчивость и предсказуемость крупномасштабных атмосферных процессов. – М.: ИВМ РАН, 2007. – 283 с.
 50. Дымников В.П., Филатов А.Н. Устойчивость крупномасштабных атмосферных процессов. – Л.: Гидрометеиздат, 1990. – 236 с.
 51. Дымников В.П., Филатов А.Н. Основы математической теории климата. – М.: ВИНТИ, 1994. – 252 с.
 52. Дымников В.П., Володин Е.М., Галин В.Я., Глазунов А.В., Гришун А.С., Дианский Н.А., Лыкосов В.Н. Чувствительность климатической системы к малым внешним воздействиям. – Метеорология и климатология, 2004. – № 4. – С. 77–92.
 53. Дымников В.П., Лыкосов В.Н., Володин Е.М. Проблемы моделирования климата и его изменений. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2006. – Т. 42. – С. 618–636.
 54. Дымников В.П., Лыкосов В.Н., Володин Е.М., Галин В.Я., Глазунов А.В., Гришун А.С., Дианский Н.А., Толстых М.А., Чавро А.И. Моделирование климата и его изменений. – В кн. «Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования», т. 2 «Математическое моделирование», М.: Наука, 2005. – С. 38–175.
 55. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 312 с.
 56. Зилитинкевич С.С. Динамика пограничного слоя. – Л.: Гидрометеиздат, 1974. – 291 с.
 57. Зилитинкевич С.С., Монин А.С., Туриков В.Г., Чаликов Д.В. Численная модель глобального взаимодействия атмосферы и океана. – Докл. АН СССР, 1976. – Т. 230. – С. 556–559.
 58. Казаков А.Л., Лыкосов В.Н. О параметризации взаимодействия атмосферы с подстилающей поверхностью при численном моделировании атмосферных процессов. – Тр. Зап. Сиб. НИИ, 1982. – вып. 55, М.: Гидрометеиздат. – С. 3–20.
 59. Калачев А.В. Многоядерные процессоры. – М.: Интернет-университет информационных технологий, БИНОМ: Лаборатория знаний, 2010. – 247 с.
 60. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. 5-е изд. – Л.-М., 1962. – 695 с.

61. *Кибель И.А.* Приложение к метеорологии уравнений механики бароклинной жидкости. – Изв. АН СССР, сер. географ. и геофиз., 1940. – № 5.
62. *Кибель И.А.* Введение в гидродинамические методы краткосрочного прогноза погоды. – М.: Гостехиздат, 1957. – 376 с.
63. *Колмогоров А.Н.* Локальная структура турбулентности в несжимаемой жидкости при очень больших числах Рейнольдса. – Докл. АН СССР, 1941. – Т. 32. – С. 19–21.
64. *Колмогоров А.Н.* Уравнения турбулентного движения несжимаемой жидкости. – Изв. АН СССР, сер. физ., 1942. – Т. 6. – № 1-2. – С. 56–68.
65. *Кондратьев К.Я.* Актинометрия. – Л.: Гидрометеоздат, 1966. – 691 с.
66. *Корнеев В.Д.* Параллельное программирование в MPI. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. – 209 с.
67. *Королев Л.Н.* Структуры ЭВМ и их математическое обеспечение. – М., 2 изд., 1978. – 352 с.
68. *Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В.* Теоретическая гидромеханика, часть 1. – М.: Физматгиз, 1963а. – 584 с.
69. *Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В.* Теоретическая гидромеханика, часть 2. – М.: Физматгиз, 1963б. – 728 с.
70. *Креков Г.М., Рахимов Р.Ф.* Оптические модели атмосферного аэрозоля. – Томск: Изд. Томского филиала СО АН СССР, 1986. – 294 с.
71. *Крупчатников В.Н., Володин Е.М., Галин В.Я., Лыкосов В.Н.* Климатология приповерхностных потоков CO₂ в совместной модели общей циркуляции атмосферы, растительности и почвы: случай с заданной архитектурой растительности. – В сб. "Вычислительная математика и математическое моделирование" (Труды международной конференции, посвященной 75-летию академику Г.И. Марчука и 20-летию Института вычислительной математики РАН, Москва, Россия, 19-22 июня 2000 г.). – Т. 2. – С. 97–112.
72. *Кузнецов С.П.* Динамический хаос (курс лекций). – М.: Изд. физ.-мат. литературы, 2001. – 296 с.
73. *Кулямин Д.В., Володин Е.М., Дымников В.П.* Моделирование квазидвухлетних колебаний зонального ветра в экваториальной стратосфере. Часть II. Модели общей циркуляции атмосферы. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2009. – Т. 45. – С. 43–61.
74. *Курбацкий А.Ф.* Моделирование нелокального турбулентного переноса импульса и тепла. – Новосибирск.: Наука, 1988. – 240 с.
75. *Курбацкий А.Ф.* Введение в моделирование турбулентного переноса импульса и скаляра. – Новосибирск: Академическое издательство «Гео», 2007. – 331 с.
76. *Курбацкий А.Ф., Курбацкая Л.И.* Трехпараметрическая модель турбулентности для пограничного слоя атмосферы над урбанизированной поверхностью. – Изв. РАН, Физика атмосферы и океана, 2006. – Т. 42. – С. 476–494.
77. *Ладыженская О.А.* Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. Изд. 2 перераб. и доп. – Букинист, 1970. – 288 с.
78. *Ландау Д.Л., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. – М.: Гостехиздат, 1951. – 480 с.
79. *Ландау Д.Л., Лифшиц Е.М.* Механика сплошных сред. – М.: Гостехиздат, 1953. – 788 с.
80. *Лебедев В.И.* О методе сеток для одной системы уравнений в частных производных. – Изв. АН СССР, сер. матем., 1958. – Т. 22. – С. 717–734.
81. *Лебедев В.И.* Как решать явными методами жесткие системы дифференциальных уравнений. – Вычислительные процессы и системы, 1991. – Т. 8. – С. 237–285.

82. *Лоренц Э.Н.* Природа и теория общей циркуляции атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1970. – 259 с.
83. *Луценко С.В., Лебедев В.И., Лыкосов В.Н.* Моделирование процессов переноса почвенного аэрозоля в конвективном пограничном слое. – Тр. Междунар. конф. «Физика атмосферного аэрозоля», Москва, 12-17 апреля 1999 г., М., 1999. – С. 216–229.
84. *Лыкосов В.Н.* О проблеме замыкания моделей турбулентного пограничного слоя с помощью уравнений для кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации. – Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана, 1992. – Т. 28. – С. 696–704.
85. *Лыкосов В.Н., Палагин Э.Г.* Динамика взаимосвязанного переноса тепла и влаги в системе атмосфера - почва. – Метеорология и гидрология, 1978. – № 8. – С. 48–56.
86. *Мазин И.П.* О климатологии и физическом строении облаков. – Изв. АН. Физика атмосферы и океана, 1994. – Т. 30. – С. 338–344.
87. *Марчук Г.И.* Численные методы в прогнозе погоды. – Л.: Гидрометеиздат, 1967. – 356 с.
88. *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики. – М: Наука, 1980. – 535 с.
89. *Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б.* Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации. – Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 296 с.
90. *Марчук Г.И., Дымников В.П., Галин В.Я., Лыкосов В.Н., Перов В.Л., Бобылева И.М., Залесный В.Б.* Гидродинамическая модель общей циркуляции атмосферы и океана (методы реализации). – Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, Информационное сообщение, 1975. – 214 с.
91. *Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б., Лыкосов В.Н., Бобылева И.М., Галин В.Я., Перов В.Л.* Математическая модель общей циркуляции атмосферы и океана. – Докл. АН СССР, 1980. – Т. 253. – С. 577–581.
92. *Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б., Лыкосов В.Н., Галин В.Я.* Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы и океана. – Л.: Гидрометеиздат, 1984. – 320 с.
93. *Матвеев Л.Т.* Динамика облаков. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 311 с.
94. *Мачульская Е.Е., Лыкосов В.Н.* Моделирование термодинамической реакции вечной мерзлоты на сезонные и межгодовые вариации атмосферных параметров. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2002. – Т. 38. – С. 20–33.
95. *Мелешко В.П., Катцов В.М., Спорышев П.В., Вавулин С.В., Говоркова В.А.* Изучение возможных изменений климата с помощью моделей общей циркуляции атмосферы и океана. – В: "Изменения климата и их последствия", Материалы специальной сессии Ученого совета Центра международного сотрудничества по проблемам окружающей среды, посвященной 80-летию академика М.И. Будыко (19-20 мая 1999 г.), СПб, 2002. – С. 13–35.
96. *Мелешко В.П., Рэнделл Д.А., Вавулин С.В., Школьник И.М.* Зависимость климатического режима в модели общей циркуляции атмосферы ГГО от методов параметризации конвекции. – В сб. "Моделирование общей циркуляции атмосферы и климата", 2001, Труды Главной Геофизической Обсерватории им. А.И. Воейкова, вып. 550, СПб, Гидрометеиздат. – С. 44–84.
97. *Меллор Дж.Л.* Осреднение по ансамблю, замыкание уравнений турбулентного обмена. – В кн: Динамика погоды. Л.: Гидрометеиздат, 1988. – С. 335–350.
98. *Миллиончиков М.Д.* К теории однородной изотропной турбулентности. – Докл. АН СССР, 1941. – Т. 32. – С. 611–614.

99. *Мирабель А.П., Монин А.С.* Двумерная турбулентность. – Успехи механики, 1979. – Т. 2. – С. 47–95.
100. *Михлин С.Г.* Вариационные методы в математической физике. 2-е изд. – М.-Л., 1970. – 512 с.
101. *Монин А.С.* О характеристиках анизотропной турбулентности. – Докл. АН СССР, 1950. – Т. 75. – С. 621–624.
102. *Монин А.С.* Прогноз погоды как задача физики. – М.: Наука, 1969. – 184 с.
103. *Монин А.С.* Введение в теорию климата. – Л.: Гидрометеиздат, 1982. – 244 с.
104. *Монин А.С.* Гидродинамическая неустойчивость. – Успехи физических наук, 1986. – Т. 150. – С. 61–105.
105. *Монин А.С., Обухов А.М.* Основные закономерности турбулентного перемешивания в приземном слое атмосферы. – Труды Геофиз. инст. АН СССР, 1954. – № 24 (151). – С. 163–187.
106. *Монин А.С., Шишков Ю.А.* История климата. – Л.: Гидрометеиздат, 1979. – 407 с.
107. *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика. Часть 1: механика турбулентности. – М.: Наука, 1965. – 639 с.
108. *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика. Механика турбулентности. Часть 2. – М.: Наука, 1967. – 720 с.
109. *Мортиков Е.В.* Применение метода погруженной границы для решения системы уравнений Навье-Стокса в областях сложной конфигурации. – Вычислительные методы и программирование, 2010. – Т. 11. – С. 36–46.
110. *Мортиков Е.В.* Применение графических процессоров для численного моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации с помощью метода погруженной границы. – Вычислительные методы и программирование, 2012. – Т. 13. – С. 177–191.
111. *Мохов И.И., Демченко П.Ф., Елисеев А.В., Хон В.Ч., Хворостьянов Д.В.* Оценки глобальных и региональных изменений в климатической модели ИФА РАН в XIX–XXI веках с учетом антропогенных воздействий. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2002. – Т. 38. – С. 629–642.
112. *Никонов С.А.* Обобщенный двухпоточковый метод решения уравнения переноса солнечной радиации в плоском слое. – Метеорология и гидрология, 1995. – № 3. – С. 37–48.
113. *Обухов А.М.* К вопросу о геострофическом ветре. – Изв. АН СССР, серия географ. и геофиз., 1949. – № 4. – С. 281–306.
114. *Ольшанский М.А.* Лекции и упражнения по многосеточным методам. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2003. – 176 с.
115. *Палагин Э.Г.* Математическое моделирование агрометеорологических условий перезимовки озимых культур. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 191 с.
116. *Робер А.* Полунейный метод. – В: Численные методы, используемые в атмосферных моделях / Пер. с англ. под ред. В.П.Садокова, Л.: Гидрометеиздат, 1982. – С. 302–315.
117. *Рябенький В.С., Филиппов А.Ф.* Об устойчивости разностных уравнений. – М.: Гостехиздат, 1956. – 172 с.
118. *Самарский А.А.* О регуляризации разностных схем. – Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1967. – Т. 7. – С. 62–93.
119. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
120. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
121. *Саркисян А.С.* Основы теории и расчет океанических течений. – Л.: Гидрометеиздат, 1966. – 121 с.

122. Семилетов И.П. О роли водных и наземных экосистем Арктики в формировании планетарных максимумов CH_4 и CO_2 в атмосфере. – Докл. АН, 1996. – Т. 348. – С. 817–820.
123. Скворцов А.В. Триангуляция Делоне и ее применение. – Томск: Изд-во Томского ун-та, 2002. – 128 с.
124. Степаненко В.М. Численное моделирование термического режима мелких водоемов. – Вычислительные технологии, 2005. – Т. 10. – Ч. 1. – С. 100–106.
125. Степаненко В.М., Глазунов А.В., Микушин Д.Н., Лыкосов В.Н. Суперкомпьютерное моделирование климатических процессов. – В кн.: Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности (под ред. В.А. Садовниченко, Г.И. Савина и Вл.В. Воеводина). – М.: Издательство Московского университета, 2009 (доступна в Интернете по адресу <http://hpc-russia.ru/5.pdf>).
126. Степаненко В.М., Лыкосов В.Н. Численное моделирование процессов теплообмена в системе водоем – грунт. – Метеорология и гидрология, 2005. – № 3. – С. 95–104.
127. Степаненко В.М., Мачульская Е.Е., Глаголев М.В., Лыкосов В.Н. Моделирование эмиссии метана из озер зоны вечной мерзлоты. – Изв. РАН. Физика атмосферы и океана, 2011. – Т. 47. – С. 275–288.
128. Степаненко В.М., Микушин Д.Н. Численное моделирование мезомасштабной динамики атмосферы и переноса примеси над гидрологически неоднородной поверхностью. – Вычислительные технологии, 2008. – Т. 13. – Вып. 3. – С. 103–110.
129. Степаненко В.М., Миранда П.М., Лыкосов В.Н. Численное моделирование мезомасштабного взаимодействия атмосферы и гидрологически неоднородной суши. – Вычислительные технологии, 2006. – Т. 11. – Вып. 3. – С. 118–127.
130. Струнин М.А. Турбулентность и турбулентный обмен в пограничном слое атмосферы над неоднородной поверхностью. – Автореферат на соискание ученой степени д.ф.-м.н., Москва, 2006. – 42 с.
131. Терехов К.М. Параллельная реализация модели общей циркуляции океана. – Дипломная работа, М.: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 2010. – 39 с.
132. Толстых М.А. Глобальная полулагранжева модель численного прогноза погоды. – М.; Обнинск: ОАО ФООП, 2010. – 111 с.
133. Тыртышников Е.Е. Методы численного анализа. – М.: МГУ, 2006. – 291 с.
134. Унтерштейнер Н. Криосфера. – В: "Глобальный климат" (пер. с английского и ред. А.М. Булыгина, М.Я. Вербицкого, Г.В. Грузы, Е.И. Каганова, В.Д. Казначеевой, М.А. Прокофьева, Ю.Д. Реснянского, К.Г. Рубинштейна, В.А. Рябченко, Д.В. Чаликова). Л.: Гидрометеиздат, 1987. – С. 259–297.
135. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. – М., Л.: Физматгиз, 1963. – 736 с.
136. Федоренко Р.П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений. – ЖВМиМФ, 1961. – Т. 1. – С. 922–927.
137. Федоренко Р.П. Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений. – УМН, 1973. – Т. 28. – С. 121–182.
138. Фейгельсон Е.М. Радиация в облачной атмосфере. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 280 с.
139. Фридман А.А., Келлер Л.В. Дифференциальные уравнения турбулентного движения сжимаемой жидкости. – В кн.: А. А. Фридман. Избранные труды. М.: Наука, 1966.
140. Хартрей Д.Р. Эниак – электронная счетная машина. – УМН, 1948. – Т. 3. – С. 146–158.

141. Хромов С.П., Петросянц М.А. Метеорология и климатология. – Л.: Гидрометеиздат, 2004.
142. Чавро А.И., Дмитриев Е.В. Статистическая модель восстановления региональной структуры геофизических полей. – Метеорология и гидрология, 2002. – № 6. – С. 39–49.
143. Чеботарев А.И. Общая гидрология (воды суши), 2-е изд. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – 530 с.
144. Шайдулов В.В. Многосеточные методы конечных элементов. – М.: Наука, 1989. – 288 с.
145. Школьник И.М., Мелешко В.П., Павлова Т.В. Региональная гидродинамическая модель атмосферы для исследования климата на территории России. – Метеорология и гидрология, 2000. – № 4. – С. 32–49.
146. Юрова А.А., Володин Е.М. Совместное моделирование климата с учетом динамики растительного покрова. – Изв. РАН, Физика атмосферы и океана, 2011. – Т. 47. – С. 579–588.
147. Adams L. An M-step preconditioned conjugate gradient methods. – SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1985. – V. 6 – P. 452–463.
148. Adams L., Ortega J. A multi-color SOR method for parallel computation. – Proc. 1982 Int. Conf. Parallel Processing, 1982. – P. 53–56.
149. Adams L., LeVeque R., Young D. Analysis of the SOR iteration for the 9-point Laplacian. – SIAM J. Numer. Anal., 1988. – V. 25. – P. 1156–1180.
150. Adcroft A., Campin J., Hill C., Marshall J. Implementation of an atmosphere-ocean general circulation model on the expanded spherical cube. – Mon. Wea. Rev., 2004. – V. 132. – P. 2845–2863.
151. Andre J.C. A third-order-closure model for the evolution of a convective planetary boundary layer. – In: Seminars on the treatment of the boundary layer in numerical weather prediction, Reading, 6-10 September 1976. – P. 205–233.
152. Andre J.C., de Moor G., Lacarrere P., du Vachat R. Turbulence approximation for inhomogeneous flows. Part I: the clipping approximation. – J. Atmos. Sci., 1976. – V. 33. – P. 476–81.
153. Andren A., Brown A.R., Graf J., Mason P.J., Moeng C.-H., Nieuwstadt F.T.M. Large-eddy simulation of the neutrally stratified boundary layer: a comparison of four computer codes. – Quart. J. Roy. Met. Soc., 1994. – V. 120. – P. 1457–1484.
154. Ament M., Knittel G., Weiskopf D., Strasser W. A parallel preconditioned conjugate gradient solver for the poisson problem on a multi-GPU platform. – Proceedings of the 18th Euromicro Conference on Parallel Disturbed and Networkbased Processing, 2010. – P. 583–592.
155. Arakawa A. Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion: two-dimensional incompressible flow. Part I. – J. Comput. Phys., 1966. – V. 1. – P. 119–143.
156. Arakawa A. Design of the UCLA General Circulation Model. – Numerical simulation of weather and climate, 1972, Technical Report No. 7, Dept. of Meteorol., University of California, Los Angeles. – 116 p.
157. Arakawa A., Lamb V.R. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. – Methods Comput. Phys., 1977. – V. 17. – P. 173–265.
158. Arakawa A., Schubert W.H. Interaction of cumulus cloud ensemble with the large-scale environment. Part 1. – J. Atmos. Sci., 1974. – V. 31. – P. 674–701.
159. Asselin R. Frequency filter for time integrations. – Mon. Wea. Rev., 1972. – V. 100. – P. 487–490.

160. *Babuška I., Banerjee U., Osborn John E.* Generalized finite element methods: main ideas, results, and perspective. – *Int. J. Comput. Methods*, 2004. – V. 1(1). – P. 67–103.
161. *Balay S., Buschelman K., Gropp W.D., Kaushik D., Knepley M.G., McInnes L.C., Smith B.F., Zhang H.* PETSc. – Web page, 2009. – <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
162. *Baldwin M.P., Dunkerton T.J.* Quasi-biennial modulations of the Southern Hemisphere stratospheric polar vortex. – *Geophys. Res. Lett.*, 1998. – V. 25. – P. 3343–3346.
163. *Bardina J., Ferziger J.H., Reynolds W.C.* Improved subgrid scale models for large-eddy simulation. – *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut.*, 1980, Paper 80-1357.
164. *Barenblatt G.I., Golitsyn G.S.* Local structure of mature dust storms. – *J. Atmos. Sci.*, 1974. – V. 31. – P. 1917–1933.
165. *Barlow R., Evans D.* Synchronous and asynchronous iterative parallel algorithms for linear systems. – *Comput. J.*, 1982. – V. 25. – P. 56–60.
166. *Beljaars A.C.M., Holtslag A.A.M.* Flux parameterization over land surfaces for atmospheric models. – *J. Appl. Meteorol.*, 1991. – V. 30. – P. 327–341.
167. *Benzi M., Meyer C.D., Tuma M.* A sparse approximate inverse preconditioner for the conjugate gradient method. – *SIAM J. Sci. Computing*, 1996. – V. 17(5). – P. 1135–1149.
168. *Berselli L.C., Iliescu T., Layton W.J.* Mathematics of large eddy simulation of turbulent flows. – Springer. Series: Scientific Computation, 2006. – V. XVIII. – 348 p.
169. *Berthelsen P.A., Faltinsen O.M.* A local directional ghost cell approach for incompressible viscous flow problems with irregular boundaries. – *J. Comput. Phys.*, 2008. – V. 227. – P. 4354–4397.
170. *Betts A.K.* A new convective adjustment scheme. Part I. Observational and theoretical basis. – *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 1986. – V. 112. – P. 677–691.
171. *Betts A.K., Miller M.J.* A new convective adjustment scheme. – ECMWF, 1984, Technical report No. 43. – 68 p.
172. *Bishop R.E.D., Hassan A.Y.* The lift and drag forces on a circular cylinder oscillating in a flowing fluid. – *Proceedings of the Royal Society of London*, 1964. – Series A 277. – P. 51–75.
173. *Bjerknes V.* Das Problem von der Wettervorhersage, betrachtet vom Standpunkt der Mechanik und der Physik. – *Meteor. Zeitschrift*, 1904. – B. 21. – S. 1–7.
174. *Bjerknes V.* Meteorology as an exact science. – *Mon. Wea. Rev.*, 1914. – V. 42. – P. 11–14.
175. *Bjerknes J.* Atmospheric teleconnections from the equatorial Pacific. – *Mon. Wea. Rev.*, 1969. – V. 97. – P. 163–172.
176. *Bolz J., Farmer I., Grinspun E., Schroder P.* Sparse matrix solver on GPU: Conjugate gradients and multigrid. – *ACM Transaction on Graphics*, 2003. – V. 22. – P. 917–924.
177. *Bonaventura L., Redler R., Budich R.* Earth system modeling, vol. 2. Algorithms, code infrastructure and optimization. – Springer, 2011. – 96 p.
178. *Boussinesq J.* Essai sur la théorie des eaux courantes. – *Mem. Pres. Par. Div. Savant Acad. Sci.*, 1877. – V. 23. – 46 p.
179. *Boussinesq J.* Théory de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes á grande section, I-II, 1897, Paris, Gauthier-Villars.
180. *Brandt A.* Multi-level adaptive technique (MLAT) for fast numerical solution to boundary values problems. – *Proc. 3rd Int. Conf. on Numerical Methods in Fluid Mechanics*. H. Cabannes and R. Temam (eds) / *Lecture Notes in Physics*, Berlin: Springer, 1973. – V. 18. – P. 82–89.
181. *Brandt A.* Multi-level adaptive solutions to boundary value problems. – *Math. Comp.*, 1977. – V. 31. – P. 333–390.

182. *Braza M., Chassaing P., Minh H.H.* Numerical study and physical analysis of the pressure and velocity fields in the near wake of a circular cylinder. – J. Fluid Mech., 1986. – V. 165. – P. 79–130.
183. *Briegleb B.P.* Delta - Eddington approximation for solar radiation in the NCAR community climate model. – J. Geophys. Res., 1992. – V. 97. – D7. – P. 7603–7612.
184. *Brovkin V., Levis S., Loutre M.-F., Crucifix M., Claussen M., Ganopolski A., Kubatzki C., Petoukhov V.* Stability analysis of the climate-vegetation system in the northern high latitudes. – Climatic Change, 2003. – V. 57. – P. 119–138.
185. *Brown D.L., Cortez R., Minion M.L.* Accurate projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations. – J. Comput. Phys., 2001. – V. 168. – P. 464 – 499.
186. *Bryan K.A.* Numerical method for the study of the circulation of the World Ocean. – J. Comput. Phys., 1969. – V. 4. – P. 347–376.
187. *Buatois L., Caumon G., Levy B.* Concurrent number cruncher: a GPU implementation of a general sparse linear solver. – Int. J. of Parallel, Emergent and Distributed Systems, 2009. – V. 24. – P. 205–223.
188. *Bubier J., Moore T.R., Bellisario L., Comer N.T.* Ecological controls on methane emissions from a northern peatland complex in the zone of discontinuous permafrost, Manitoba, Canada. – Glob. Biogeochem. Cycles, 1995. – V. 9. – P. 455–470.
189. *Businger J.A., Wyngaard J.C., Izumi I., Bradley E.F.* Flux profile relationships in the atmospheric surface layer. – J. Atmos. Sci., 1971. – V. 28. – P. 181–189.
190. *Calahan D.* Block-oriented, local-memory-based linear equation solution on the CRAY-2: uniprocessor algorithms. – Proc. 1986 Int. Conf. Parallel Processing. – P. 375–378.
191. *Castro I.P., Cheng H., Reynolds R.* Turbulence over urban-type roughness: deductions from wind-tunnel measurements. – Bound. Layer Meteorol., 2006. – V. 118. – P. 109–131.
192. *Chapman D.* Computational aerodynamics development and outlook. – AIAA J., 1979. – V. 17. – P. 1293–1313.
193. *Chapman B., Jost G.* Using OpenMP. Portable shared memory parallel programming. – The MIT Press, 2008.
194. *Charney J.G.* On the scale of atmospheric motion. – Geophys. Publ., 1948. – V. 17. – P. 1–17.
195. *Charney J.G., Fjörtoft R., von Neumann J.* Numerical integrations of the barotropic vorticity equations. – Tellus, 1950. – V. 2. – P. 237–254.
196. *Chou M.-D., Kouvaris L.* Calculations of transmission functions in the infrared CO₂ and O₃ bands. – J. Geophys. Res., 1991. – V. 96. – D5. – P. 9003–9012.
197. *Chou M.-D., Kratz D.P., Ridgway W.* Infrared radiation parameterizations in numerical climate models. – J. Climate, 1991. – V. 4. – P. 424–437.
198. *Chou M.-D., Ridgway W., Yan M.-H.* One-parameter Scaling and Exponential-sum fitting for water vapor and CO₂ infrared transmission functions. – J. Atm. Sci., 1993. – V. 50. – P. 2294–2303.
199. *Chronopoulos A.T., Gear C.W.* s-Step iterative methods for symmetric linear systems. – J. of Computational and Applied Mathematics, 1989. – V. 25. – P. 153–168.
200. *Conrad V., Wallach Y.* A faster SSOR Algorithm. – Numer. Math., 1977. – V. 27. – P. 371–372.
201. *Clapp R.B., Hornberger M.G.* Empirical equations for some soil hydraulic properties. – Water Resources Research, 1978. – V. 14. – P. 601–604.
202. *Claussen M., Mysak L.A., Weaver A.J., Crucifix M., Fichefet T., Loutre M.-F., Weber S.L., Alcamo J., Alexeev V.A., Berger A., Calov R., Ganopolski A., Goosse H., Lohmann O., Lunkeit F., Mokhov I.I., Petoukhov V.K., Stone P., Wang Z.* Earth system

- models of intermediate complexity: closing the gap in the spectrum of climate system models. – *Climate Dynamics*, 2002. – V. 18. – P. 579–586.
203. Coakley J.A., Cess R.D., Yurevich F.B. The effect of tropospheric aerosols on the Earth's radiation budget: A parametrization for climate models. – *J. Atmos. Sci.*, 1983. – V. 40. – P. 116–138.
 204. Coceal O., Thomas T.G., Castro I.P., Belcher S.E. Mean flow and turbulence statistics over groups of urban-like cubical obstacles. – *Bound. Layer Meteorol.*, 2006. – V. 121. – P. 491–519.
 205. Concus P., Golub G., O'Leary D. A generalized conjugate gradient method for the numerical solution of elliptic partial differential equations. – In: "Sparse Matrix Computations", J. Bunch and D. Rose (eds.). – Academic Press, New York, 1976. – P. 309–322.
 206. Cosgrove J.D.F., Dias J.C., Griewank A. Approximate inverse preconditioning for sparse linear systems. – *Int. J. of Computer Mathematics*, 1992. – V. 44. – P. 91–110.
 207. Courant R., Friedrichs K., Lewy H. Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. – *Math. Ann.*, 1928. – B. 100. – S. 32–74.
 208. Covey C., AchutaRao K.M., Lambert S.J., Taylor K.E. Intercomparison of present and future climates simulated by coupled ocean-atmosphere GCMs. – PCMDI Report, 2000. – No. 66. – P. 1–20.
 209. Covey C., Abe-Ouchi A., Boer G.J., Boville B.A., Cubasch U., Fairhead L., Flato G.M., Gordon H., Guilyardi E., Jiang X., Johns T.C., Le Treut H., Madec G., Meehl G.A., Miller R., Noda A., Power S.B., Roeckner E., Russell G., Schneider E.K., Stouffer R.J., Terray L., von Storch J.-S. The seasonal cycle in coupled ocean-atmosphere general circulation models. – *Climate Dynamics*, 2000. – V. 16. – P. 775–787.
 210. Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type. – *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 1947. – V. 43 (1). – P. 50–67.
 211. CRAY. CRAY-1 Hardware Reference Manual. – Cray Research, 1977. – Publ. No. 2240004. – 204 p.
 212. Danilkin E.A., Starchenko A.V. Numerical method for solution of the equations of an atmospheric boundary layer aerothermodynamics on MCS with the distributed memory. – Abstracts of the International Conference on Environmental Observations, Modeling and Information Systems ENVIROMIS-2008, 28 June – 5 July 2008, Tomsk, Russia. – P. 59.
 213. Deardorff J.W. The counter-gradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. – *J. Atmos. Sci.*, 1966. – V. 23. – P. 503–506.
 214. Deardorff J.W. Theoretical expression for the counter-gradient vertical heat flux. – *J. Geophys. Res.*, 1972. – V. 77. – P. 5900–5904.
 215. Deardorff J.W. Efficient prediction of ground surface temperature and moisture with inclusion of a layer of vegetation. – *J. Geophys. Res.*, 1978. – V. 83. – P. 1889–1903.
 216. Deas M.L., Lowney C.L. Water temperature modeling review. – *California Water Modeling Forum*, 2000. – 113 p.
 217. Demmel J. Applied numerical linear algebra. – Philadelphia: SIAM, 1997. – 419 p. [Перевод: Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. М.: Мир, 2001, 430 с.]
 218. Demmel J., Heath M., van der Vorst H. Parallel numerical linear algebra. – *Acta Numerica*, 1993. – V. 2. – P. 111–197.
 219. de Zeeuw D., Powell K.G. An adaptively refined Cartesian mesh solver for the Euler equations. – *J. Comput. Phys.*, 1993. – V. 104. – P. 56–68.
 220. DKRZ. The ECHAM3 atmospheric general circulation model. – Technical Report No. 6, Hamburg, 1992. – 188 p.

221. *Dickinson R.E., Henderson-Sellers A., Kennedy P.J.* Biosphere-Atmosphere Transfer Scheme (BATS) Version 1e as coupled to the NCAR Community Climate Model. – NCAR Tech. Note, 1993, TN383+STR, National Center for Atmospheric Research, Boulder, CO. – 72 p.
222. *Dongarra J.J., Duff I.S., Sorensen D.C., van der Vorst H.A.* Numerical linear algebra for high-performance computers. – SIAM, 1998. – 342 p.
223. *Dongarra J., Eisenstat S.* Squeezing the most out of and algorithm in CRAY-FORTRAN. – ACM Trans. Math. Softw., 1984. – V. 10. – P. 221–230.
224. *Dongarra J., Gustavson F., Karp A.* Implementing linear algebra algorithms for dense matrices on a vector pipeline machine. – SIAM Rev., 1984. – V. 26. – P. 91–112.
225. *Dongarra J., Sameh A., Sorensen D.* Implementation of some concurrent algorithms for matrix factorization. – Parallel Comput., 1986. – V. 3. – P. 25–34.
226. *Durran D.R.* Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics. – New York, Springer-Verlag, 1999. – 465 p.
227. *Dymnikov V.P., Filatov A.N.* Mathematics of Climate Modelling. – Birkhäuser, Boston, 1996. – 264 p.
228. *Eisenstat S.* Efficient implementation of a class of conjugate gradient methods. – SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1981. – V. 2. – P. 1–4.
229. *Eymard R., Gallouët T.R., Herbin R.* The finite volume method handbook of numerical analysis. – Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions, 2000. – V. VII. – P. 713–1020.
230. *Friedrichs K.O., Hyers D.H.* Symmetric hyperbolic linear differential equations. – Commun Pure and Appl. Mathem., 1954. – V. 7. – P. 345–392.
231. *Frisch U.* Turbulence: the legacy of A.N. Kolmogorov. – Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995. – 312 p.
232. *Gage K.S., Nastrom G.D.* On the spectrum of atmospheric velocity fluctuations seen by MST/ST radar and their interpretation. – Radio Sci., 1990. – V. 20. – P. 1339–1347.
233. *Gannon D., van Rosendale J.* On the structure of parallelism in a highly concurrent PDE solver. – J. Par. Dist. Comput., 1986. – V. 3. – P. 106–135.
234. *Gao T., Tseng Y.-H., Lu X.-Y.* An improved hybrid Cartesian/immersed boundary method for fluid-solid flows. – Int. J. for Numerical Methods in Fluids, 2007. – V. 55. – P. 1189–1211.
235. *Gear C.W.* Numerical initial value problems in ordinary differential equations. – Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1971. – 271 p.
236. *Germano M.* Turbulence: the filtering approach. – J. Fluid Mech., 1992. – V. 238. – P. 325–336.
237. *Germano M., Piomelli U., Moin P., Cabot W. H.* A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. – Phys. Fluids. A, 1991. – V. 3. – P. 1760–1765.
238. *Ghosal S.* An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence. – J. Comp. Phys., 1996. – V. 141. – P. 187–206.
239. *Ghosal S., Lund T.S., Moin P., Akselvoll K.* A dynamic localization model for large eddy simulation of turbulent flows. – J. Fluid Mech., 1995. – V. 286. – P. 229–255.
240. *Gill A.E.* Circulation and bottom water production in the Weddel Sea. – Deep-Sea Res., 1979. – V. 20. – P. 111–140.
241. *Glazunov A.V., Lykossov V.N.* Large-eddy simulation of interaction of ocean and atmospheric boundary layers. – Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2003. – V. 18. – P. 279–295.
242. *Glazunov A.V., Dymnikov V.P., Lykossov V.N.* Mathematical modelling of spatial spectra of atmospheric turbulence. – Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2010. – V. 25. – P. 431–451.

243. *Golub G., Plemmons R., Sameh A.* Parallel block schemes for large scale least squares computations. – Center for Supercomputing Research and Development, University of Illinois, Report No. 574, 1986. – 20 p.
244. *Golub G., van Loan C.* Matrix computations. – Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1989. – 642 p. [Перевод: Дж. Голуб, Ч. Ван Доун. Матричные вычисления. – Мир, 1999. – 548 с.].
245. *Grabowski W.W.* An improved framework for superparameterization. – J. Atmos. Sci., 2004. – V. 61. – P. 1940–1952.
246. *Gropp W., Lusk E., Rajeev T.* Using MPI-2: advanced features of the message-passing interface. – Cambridge: MIT Press, 1999. – 382 p.
247. *Guilmineau E., Queutey P.* A numerical simulation of vortex shedding from an oscillating circular cylinder. – J. of Fluids and Structures, 2002. – V. 16. – P. 773–794.
248. *Gullbrand J., Chow F. K.* The effect of numerical errors and turbulence models in large-eddy simulations of channel flow, with and without explicit filtering. – J. Fluid Mech., 2003. – V. 495. – P. 323–341.
249. *Guy R.D., Hartenstine D.A.* On the accuracy of direct forcing immersed boundary methods with projection methods. – J. Comput. Phys., 2010. – V. 229. – P. 2479–2496.
250. *Hackbusch W.* Multi-grid methods and applications. – Berlin, Heidelberg: Springer, 1985. – 377 p.
251. *Hansen M.* Die Geschwindigkeitsverteilung in der Grenzschicht an einer eigentauchten Platte. – Z. Angew. Math. Mech., 1928. – B. 8. – S. 185–199.
252. *Heller D., Stevenson D., Traub J.* Accelerated iterative methods for the solution of tridiagonal linear systems on parallel Computers. – J. ACM, 1976. – V. 23. – P. 636–654.
253. *Herffjord K.* A study of two-dimensional separated flow by a combination of the finite element method and Navier-Stokes equations. – Dr. Ing.-Thesis, Norwegian Institute of Technology, Department of Marine Hydrodynamics, Trondheim, Norway, 1996.
254. *Hestenes M., Stiefel F.* Methods of conjugate gradients for solving linear systems. – J. Res. Natl. Bur. Stand. Sect. B., 1952. – V. 29. – P. 409–436.
255. *Hesthaven J., Gottlieb S., Gottlieb D.* Spectral methods for time-dependent problems. – Cambridge UP, Cambridge, UK, 2007. – 284 p.
256. *Hildebrand F.B.* Introduction to numerical analysis (2nd edition ed.). – McGraw-Hill, 1974. – 669 p.
257. *Hines C.O.* Doppler spread parameterization of gravity wave momentum deposition in the middle atmosphere. Part 1. Basic formulation. – J. Atm. Sol. Terr. Phys., 1997a. – V. 59. – P. 371–386.
258. *Hines C.O.* Doppler spread parameterization of gravity wave momentum deposition in the middle atmosphere. Part 1. Broad and quasimonochromatic spectra, and implementation. – J. Atm. Sol. Terr. Phys., 1997b. – V. 59. – P. 387–400.
259. *Hogan K.* Current and future methane emissions from natural sources. – Washington, DC: US Environ. Prot. Agency, Off. Atmos. Indoor Air Prog. (EPA 430-R-93-011), 1993.
260. *Hoyas S., Jiménez J.* Scaling of the velocity fluctuations in turbulent channels up to $Re_\tau = 2003$. – Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2005. – P. 351–356.
261. *Ingram D.M., Causon D.M., Mingham C.G.* Developments in Cartesian cut cell methods. – Mathematics and Computers in Simulation, 2003. – V. 61. – P. 561–572.
262. *IPCC.* Climate Change 2001. The Scientific Basis. – J.T. Houghton, Y. Ding, D.J. Griggs et al. (Eds), Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge, 2001. – 881 p.
263. *IPCC.* Climate Change 2007: The Physical Science Basis. – Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on

- Climate Change [Solomon, S., D. Qin, M. Manning, Z. Chen, M. Marquis, K.B. Averyt, M. Tignor and H.L. Miller (eds.)], Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 2007. – 996 p.
264. *Janjic Z.I., Gerrity J.P., Nickovic S.* An alternative approach to nonhydrostatic modeling. – Mon. Wea. Rev., 2001. – V. 129. – P. 1164–1178.
 265. *Jerlov N.* Optical oceanography. – Berlin: Elsevier, 1968. – 194 p.
 266. *Jiménez J.* On why dynamic subgrid-scale models work. – Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. Annual Research Briefs, 1995. – 10 p.
 267. *Joseph J.H., Wiscombe W.J., Weinman J.A.* The delta-Eddington approximation for radiative flux transfer. – J. Atm. Sci., 1976. – V. 33. – P. 2452–2459.
 268. *Kármán Th. von.* Mechanische Ähnlichkeit und Turbulenz. – Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. Kl., 1930. – S. 58–76.
 269. *Katopodes F.C., Street R.L., Xue M., Ferziger J.H.* Explicit filtering and reconstruction turbulence modeling for large-eddy simulation of neutral boundary layer flow. – J. Atm. Sci., 2005. – V. 62. – P. 2058–2076.
 270. *Kelley J. G. W., Hobgood J. S., Bedford K. W., Schwab D. J.* Generation of three-dimensional lake model forecasts for lake Erie. – Wea. Forecast., 1998. – V. 13. – P. 659–687.
 271. *Kelly R.* GPU computing for atmospheric modeling. Experience with a small kernel and implications for a full model. – Computing in Science and Engineering, 2010. – P. 26–32.
 272. *Kirk D.B., Hwu W.W.* Programming massively parallel processors. A hands-on approach. – San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2010. – 258 p.
 273. *King M.D., Harshvardhan.* Comparative accuracy of selected multiple scattering approximations. – J. Atm. Sci., 1986. – V. 43. – P. 784–801.
 274. *Kraichnan R.* Classical fluctuation-relaxation theorem. – Phys. Rev., 1959. – V. 113. – P. 1181–1182.
 275. *Kravchenko A. G., Moin P.* On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. – J. Comp. Phys., 1997. – V. 131. – P. 310–322.
 276. *Kumar V.S., Nanjundiah R., Thazhuthaveetil M.J., Govindarajan R.* Impact of message compression on the scalability of an atmospheric modeling application on clusters. – Parallel Computing, 2008. – V. 34. – P. 1–16.
 277. *Kuo H.L.* Further studies on the parameterization of the influence of cumulus convection on large-scale flow. – J. Atmos. Sci., 1974. – V. 31. – P. 1231–1240.
 278. *Lai M.-C., Peskin C.S.* An immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. – J. Comput. Phys., 2000. – V. 160. – P. 705–719.
 279. *Lambiotte J.* The solution of linear systems of equations on a vector computer. – Ph. D. dissertation, University of Virginia, 1975.
 280. *Lashof D.A., DeAngelo B.J., Saleska S.R., Harte J.* Terrestrial ecosystem feedbacks to global climate change. – Annu. Rev. Energy Environ., 1997. – V. 22. – P. 75–118.
 281. *Lebedev V.I.* Zolotarev polynomials and extremum problems. – Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 1994. – V. 9. – P. 231–263.
 282. *Lebedev V.I.* An introduction to functional analysis in computational mathematics. – Birkhäuser, Boston, 1997. – 255 p.
 283. *Lebedev V.I., Loutsenko S.V., Lykossov V.N.* Large-eddy simulation of convective boundary layer using explicit difference schemes. – Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2000. – V. 15. – P. 95–110.
 284. *Lele S.K.* Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. – J. Comput. Phys., 1992. – V. 103. – P. 16–42.
 285. *Lemus L.D., Rikus L., Martin C., Platt R.* Global cloud liquid water path simulations. – J. Climate, 1997. – V. 10. – P. 52–64.

286. *Leonard B.P.* A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. – *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 1979. – V. 19. – P. 59–98.
287. *Levitus S.* World Ocean Atlas - CD-ROM Data Set. – U.S. Department of Commerce, National Oceanic and Atmospheric Administration, National Environmental Satellite Data and Information Service, National Oceanographic Data Center, Ocean Climate Laboratory, 1994.
288. *Lewis J.M.* Clarifying the dynamics of the general circulation: Phillips's 1956 experiment. – *Bull. Amer. Met. Soc.*, 1998. – V. 79. – P. 39–60.
289. *Lieber M., Grützun V., Wolke R., Müller M.S., Nagel W.E.* Highly scalable dynamic load balancing in the atmospheric modeling system COSMO-SPECS+FD4. – PARA 2010, June 6 – 9, Reykjavík, Iceland. – 11 p.
290. *Lilly D.K.* A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. – *Phys. Fluids A*, 1992. – V. 4. – P. 633–635.
291. *Lindzen R.S.* Turbulence and stress owing to gravity wave and tidal breakdown. – *J. Geophys. Res.*, 1981. – V. 86. – P. 9707–9714.
292. *Liu S., Katz J., Meneveau C.* Evolution and modeling of subgrid scales during rapid straining of turbulence. – *J. Fluid Mech.*, 1999. – V. 387. – P. 281–320.
293. *Liu C., Sheng X., Sung C.H.* Preconditioned multigrid methods for unsteady incompressible flows. – *J. Comput. Phys.*, 1998. – V. 139. – P. 35–57.
294. *Lorenz E.N.* Deterministic non-periodic flow. – *J. Atmos. Sci.*, 1963. – V. 20. – P. 130–141.
295. *Lund T.S.* On the use of discrete filters for large eddy simulation. – Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1997. – P. 83–95.
296. *Lund T.S., Kaltenbach H.-J.* Experiments with explicit filtering for LES using a finite-difference method. – Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, 1995. – P. 91–105.
297. *Lykossov V.N.* Atmospheric and Oceanic Boundary Layer Physics. – In: “Wind Stress over the Ocean” (Eds. Ian S.F. Jones and Yoshiaki Toba), Cambridge University Press, 2001. – P. 54–81.
298. *Lykossov V.N.* Numerical modeling of interaction between the atmospheric boundary layer and the Antarctic ice shelf. – *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 2001. – V. 16. – P. 315–330.
299. *Lykossov V.N., Wamser C.* Turbulence intermittency in the atmospheric surface layer over snow-covered sites. – *Bound. Layer Meteorol.*, 1995. – V. 72. – P. 393–409.
300. *Lumley J.L.* Some comments on turbulence. – *Phys. Fluids A*, 1992. – V. 4. – P. 203–211.
301. *Lyn D.A., Einav S., Rodi W., Park J.-H.* A laser-Doppler velocimetry study of ensemble averaged characteristics of the turbulent near wake of a square cylinder. – *J. Fluid Mech.*, 1995. – V. 304. – P. 285–312.
302. *Lynn B.H., Abramopoulos F., Avissar R.* Using similarity theory to parameterize mesoscale heat fluxes generated by subgrid-scale landscape discontinuities in GCMs. – *J. Climate*, 1996. – V. 8. – P. 932–951.
303. *Mahfouf J.F., Richard E., Mascart P.* The influence of soil and vegetation on the development of mesoscale circulation. – *J. Appl. Meteor.*, 1987. – V. 26. – P. 1483–1495.
304. *Mahrt L.* Grid-averaged surface fluxes. – *Mon. Wea. Rev.*, 1987. – V. 115. – P. 1550–1560.
305. *Mahrt L.* Surface heterogeneity and vertical structure of the boundary layer. – *Bound. Layer Meteorol.*, 2000. – V. 96. – P. 33–62.

306. *Manabe S., Bryan K.* Climate and the ocean circulation. – *Mon. Wea. Rev.*, 1969. – V. 97. – P. 739–827.
307. *Manzini E., McFarlane N.A., McLandress C.* Impact of the Doppler-spread parameterization on the simulation of the middle atmosphere circulation using the MAECHAM4 general circulation model. – *J. Geoph. Res.*, 1997a. – V.102. – P. 751–762.
308. *Manzini E., McFarlane N.A., McLandress C.* Middle atmosphere simulations with the ECHAM4 model: Sensitivity to the Doppler spread gravity wave parameterization. – In: “Gravity wave processes. Their parameterization in global climate models”, edited by Hamilton K., NATO ASI Series, Series I, Global Environmental Change, 1997b. – V. 50. – P. 367–381.
309. *Mason, P.J., Thomson D.J.* Stochastic backscatter in large-eddy simulations of boundary layers. – *J. Fluid Mech.*, 1992. – V. 242. – P. 51–78.
310. *Mattes R.K., Bowen H.D.* Water vapor transfer in the soil by thermal gradients and its control. – *Trans. ASAE*, 1963. – V. 6. – P. 244–248.
311. *McCumber M.C., Pielke R.A.* Simulation of the effects of the surface fluxes of heat and moisture in a mesoscale numerical model. Part 1. Soil layer. – *J. Geoph. Res.*, 1981. – V. 86. – No. C10. – P. 9929–9938.
312. *McBryan O., van de Velde E.* Parallel algorithms for elliptic equations. – *Commun. Pure Appl. Math.*, 1985. – V. 38. – P. 769–795.
313. *McWilliams J.C.* Fundamentals of geophysical fluid dynamics. – Cambridge University Press, Cambridge, 2006. – 249 p.
314. *Medovikov A.A.* High order explicit methods for parabolic equations. – *BIT*, 1998. – V. 38. – P. 372–390.
315. *Mellor G.L., Yamada T.* A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. – *J. Atmos. Sci.*, 1974. – V. 31. – P. 1791–1806.
316. *Mellor G.L., Yamada T.* Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. – *Rev. of Geoph. and Space Phys.*, 1982. – V. 20. – P. 851–875.
317. *Mesinger F., Janjic Z. I., Nickovic S., Gavrilov D., Deaven D. G.* The step-mountain coordinate: Model description, and performance for cases of Alpine lee cyclogenesis and for a case of an Appalachian redevelopment. – *Mon. Wea. Rev.*, 1988. – V. 116. – P. 1493–1518.
318. *Meurant G.* The block preconditioned conjugate gradient method on vector Computers. – *BIT*, 1984. – V. 24. – P. 623–633.
319. *Michalakes J., Vachhjarajani M.* GPU acceleration of numerical weather prediction. – *Parallel Processing Letters*, 2008. – V.18. – P. 531–548.
320. *Miller M.J., White A.A.* On the non-hydrostatic equations in pressure and sigma coordinates. – *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 1984. – V. 110. – P. 515–533.
321. *Mininni P.D., Rosenberg D.L., Reddy R., Pouquet A.* A hybrid MPI-OpenMP scheme for scalable parallel pseudospectral computations for fluid turbulence. – *Parallel Computing*, 2011. – V. 37. – P. 316–326.
322. *Miranda P.M.A.* Gravity waves and wave drag in flow past three-dimensional isolated mountains. – PhD Thesis, University of Reading, 1990. – 191 p.
323. *Miranda P.M.A., James I.N.* Non-linear three-dimensional effects on gravity wave drag: splitting flow and breaking waves. – *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 1992. – V. 118. – P. 1057–1082.
324. *Mirin A., Worley P.* Extending scalability of the Community atmosphere model. – *J. Phys.: Conference Series*, 2007. – V. 78. – doi:10.1088/1742-6596/78/1/012082 – 8 p.
325. *Mittal R., Iaccarino G.* Immersed boundary methods. – *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2005. – V. 37. – P. 239–261.

326. *Mori Y., Peskin C.S.* Implicit second-order immersed boundary methods with boundary-mass. – Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2008. – V. 197. – P. 2049–2067.
327. *Morinishi Y., Lund T. S., Vasilyev O.V., Moin P.* Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow. – J. Comput. Phys. 1998. – V. 143. – P. 90–124.
328. *Morison R., Otto S.* The scattered decomposition for finite elements. – J. Sci. Comput., 1987. – V. 2. – P. 59–76.
329. *Nastrom G.D., Gage K.S.* A climatology of atmospheric wavenumber spectra of wind and temperature observed by commercial aircraft. – J. Atmos. Sci., 1985. – V. 42. – P. 950–960.
330. *Ogura Y.* A consequence of the zero - fourth cumulant - approximation in the decay of isotropic turbulence. – J. Fluid Mech., 1963. – V. 16. – P. 33–40.
331. *O'Leary D., Stewart G.* Data-flow algorithms for parallel matrix computations. – Commun. ACM, 1985. – V. 28. – P. 840–853.
332. *O'Leary D.* Parallel implementation of the block conjugate gradient algorithm. – Parallel Comput., 1987. – V. 5. – P. 127–140.
333. *Ol'shanskii M.A., Staroverov V.M.* On simulation of outflow boundary conditions in finite difference calculations for incompressible fluid. – Int. J. for Numerical Methods in Fluids, 2000. – V. 33. – P. 499–534.
334. *Ongroen A., Rockwell D.* Flow structure from an oscillating cylinder. Part 1. Mechanisms of phase shift and recovery in the near wake. – J. Fluid Mech., 1988. – V. 191. – P. 197–223.
335. *Oort A.M., von der Haar T.H.* On the observed annual cycle in the ocean-atmosphere heat balance over the Northern Hemisphere. – J. Phys. Oceanogr., 1976. – V. 6. – P. 781–800.
336. *Orlanski I.* A rational subdivision of scales for atmospheric processes. – Bull. Am. Met. Soc., 1975. – V. 56. – P. 527–530.
337. *Orlanski I.* A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. – J. Comput. Phys., 1976. – V. 21. – P. 251–269.
338. *Orszag A.* Transform method for calculation of vector coupled sums: application to the spectral form of the vorticity equation. – J. Atmos. Sci., 1970. – V. 27. – P. 890–895.
339. *Ortega J.* Efficient implementations of certain iterative methods. – Applied Mathematics Report No. RM-87-02, University of Virginia. 1987.
340. *Ortega M.* Introduction to parallel and vector solution of linear systems. – Springer, 1988. – 305 p. [Перевод: Дж. Ортега. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. – М.: Мир. 1991. – 367 с.].
341. *Palmer T.N., Shutts G.J., Swinbank R.* Alleviation of a systematic westerly bias in general circulation and numerical weather prediction models through an orographic gravity wave drag parametrization. – Quart. J. Roy. Met. Soc., 1986. – V. 112. – P. 1001–1031.
342. *Pan D.M., Randall D.A.* A cumulus parameterization with prognostic closure. – Quart. J. Roy. Met. Soc., 1998. – V. 124. – P. 949–981.
343. *Park N., Yoo J.Y., Choi H.* Discretization errors in large eddy simulation: on the suitability of centered and upwind-biased compact difference schemes. – J. Comput. Phys., 2004. – V. 198. – P. 580–616.
344. *Parmesan C., Root T.L., Willig M.R.* Impacts of extreme weather and climate on terrestrial biota. – Bull. Amer. Met. Soc., 2000. – V. 81. – P. 443–450.
345. *Phillips N.* The general circulation of the atmosphere: a numerical experiment. – Quart. J. Roy. Met. Soc., 1956. – V. 82. – P. 123–164.

346. *Phillips T.J.* A summary documentation of the AMIP models. – PCMDI Report, Lawrence Livermore National Laboratory, CA, 1994. – No. 18. – 343 p.
347. *Pielke R.A.* Mesoscale meteorological modeling. – International Geophysics Series, v. 78, Academic Press, 2002. – 693 p.
348. *Pinelli A., Naqavi I.Z., Piomelli U., Favier J.* Immersed-boundary methods for general finite-difference and finite-volume Navier-Stokes solvers. – J. Comput. Phys., 2010. – V. 229. – P. 9073–9091.
349. *Porte-Agel F., Meneveau C., Parlange M.B.* A scale-dependent dynamic model for large-eddy simulation: application to a neutral atmospheric boundary layer. – J. Fluid Mech., 2000. – V. 415. – P. 261–284.
350. *Prandtl L.* Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz. – Zs. Angew. Math. Mech., 1925. – B. 5. – S. 136–139.
351. *Prather M., Derwent R., Ehhalt D., Fraser P., Sanhueza E., Zhou X.* Other trace gases and atmospheric chemistry. – In: Climate Change 1994: Radiative Forcing of Climate Change (ed. J.T. Houghton, L.G. Meira Filho, J. Bruce, H. Lee, B.A. Callander et al.), Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995. – V. 2. – P. 73–126.
352. *Raich J.W., Schlesinger W.H.* The global carbon dioxide flux in soil respiration and its relationship to vegetation and climate. – Tellus B., 1992. – V. 44. – P. 81–99.
353. *Razafindralandy D., Hamdouni A.* Consequences of symmetries on the analysis and construction of turbulence models. – SIGMA, 2006. – V. 2. – Paper 052. – 20 p.
354. *Reid J.* On the method of conjugate gradients for the solution of large sparse systems of linear equations. – Proc. Conf. Large Sparse Sets of Linear Equations, Academic Press, 1971, New York.
355. *Reinecke P.A., Durran D.* The overamplification of gravity waves in numerical solutions to flow over topography. – Mon. Wea. Rev., 2009. – V. 137. – P. 1533–1549.
356. *Reynolds O.* An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels. – Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1883. – V. 174. – P. 935–982.
357. *Reynolds O.* On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. – Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1894. – V. 186. – P. 123–161 (русск. перевод в сб. «Проблемы турбулентности», М.:ОНТИ, 1936, с. 185–227).
358. *Richardson L.F.* Weather Prediction by Numerical Process. – Cambridge University Press, 1922. – 236 p.
359. *Ringler T., Heikes R., Randall T.* Modeling the atmospheric general circulation using a spherical geodesic grid: a new class of dynamic cores. – Mon. Wea. Rev., 2000. – V. 128. – P. 2471–2490.
360. *Rizzo B., Wilken E.* Assessing the sensitivity of Canada's forests to climatic change. – Clim. Change, 1992. – V. 21. – P. 37–55.
361. *Robert A.J., Henderson J., Turnbull C.* An implicit time integration scheme for baroclinic modes in the atmosphere. – Mon. Wea. Rev., 1972. – V. 100. – P. 329–335.
362. *Rockel B., Raschke E., Weyres B.* A parameterization of broad band radiative transfer properties of water, ice and mixed clouds. – Contr. Phys. Atmos., 1991. – V. 64. – P. 1–12.
363. *Rogallo R.S., Moin P.* Numerical simulation of turbulent flow. – Ann. Rev. Fluid Mech., 1984. – V. 16. – P. 99–137.
364. *Roma A.M., Peskin C.S., Berger M.J.* An adaptive version of the immersed boundary method. – J. Comput. Phys., 1999. – V. 153. – P. 509–534.
365. *Rotta J.C.* Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz. – Zs. Phys., 1951. – B. 131. – S. 51–77.
366. *Ryoo S., Rodrigues C.I., Baghsorkhi S.S., Stone S.S.* Optimization principles and application performance evaluation of a multithreaded GPU using CUDA. – In:

- Proceedings of the 13th ACM SIGPLAN Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming, Salt Lake City, UT, 2008. – P. 73–82.
367. *Saad Y.* Communication complexity of the gaussian elimination algorithm on multiprocessors. – *Lin. Alg. Appl.*, 1986. – V. 77. – P. 315–340.
 368. *Saad Y.* Iterative methods for sparse linear systems. 2-nd edition – Philadelphia: SIAM, 2003. – 528 p.
 369. *Sadourny R.* Conservative finite-difference approximations of the primitive equations on quasi-uniform spherical grids. – *Mon. Wea. Rev.*, 1972. – V. 100. – P. 136–144.
 370. *Sagaut P.* Large eddy simulation for incompressible flows. An Introduction. – Third edition: Springer, 2006. – 556 p.
 371. *Sagaut P., Deck S., Terracol M.* Multiscale and multiresolution approaches in turbulence. – London: Imperial College Press, 2006. – 356 p.
 372. *Satoh M., Tomita H., Miura H., Iga S., Nasuno T.* Development of a global cloud resolving model. A multi-scale structure of tropical convections. – *J. Earth Simulator*, 2005. – V. 3. – P. 1–9.
 373. *Schalkwijk J., Griffith E.J., Post F.H., Jonker H.J.J.* High performance simulations of turbulent clouds on a desktop PC: exploiting the GPU. – *Bull. Amer. Met. Soc.*, 2012. – V. 93. – P. 307–314.
 374. *Schär C., Lüthi D., Beyerle U.* The soil-precipitation feedback: a process study with a regional climate model. – *J. Climate*, 1999. – V. 12. – P. 722–741.
 375. *Schubauer G.B., Klebanoff P.S.* Investigation of separation of the turbulent boundary layer. – *Natl. Advis. Comm. Aeronaut.*, 1951. – Rep. 1030.
 376. *Sellers P.J., Minth Y., Sud Y.C., Dalcher A.* A simple biosphere model (Sib) for use within general circulation models. – *J. Atm. Sci.*, 1986. – V. 43. – P. 505–531.
 377. *Shanehchi J., Evans D.* Further Analysis of the QIF Method. – *Int. J. Comput. Math.*, 1982. – V. 11. – P. 143–154.
 378. *Shukla J., Hagedorn R., Hoskins B., Kinter J., Marotzke J., Miller M., Palmer T.N., Slingo J.* Revolution in climate prediction is both necessary and possible. A declaration at the World Modelling Summit for Climate Prediction. – *Bull. Amer. Met. Soc.*, 2009. – V. 90. – P. 175–178.
 379. *Sitch S., Smith B., Prentice I.C., Arneth A., Bondeau A., Cramer W., Kaplan J., Levis S., Lucht W., Sykes M., Thonicke K., Venevsky S.* Evaluation of ecosystem dynamics, plant geography and terrestrial carbon cycling in the LPJ Dynamic Global Vegetation Model. – *Global Change Biology*, 2003. – V. 9. – P. 161–185.
 380. *Skamarock W.C.* Evaluating mesoscale NWP models using kinetic energy spectra. – *Mon. Wea. Rev.*, 2004. – V. 132. – p. 3019–3032.
 381. *Skålin R.* Scalability of parallel gridpoint limited-area atmospheric models. Part II: Semi-implicit time-integration schemes. – *J. Atmos. Oceanic Techn.*, 1997. – V. 14. – P. 442–455.
 382. *Slingo A.* A GCM parameterization for shortwave radiative properties of water clouds. – *J. Atmos. Sci.*, 1989. – V. 46. – P. 1419–1427.
 383. *Slingo J.M.* The development and verification of a cloud prediction scheme for the ECMWF model. – *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 1987. – V. 113. – P. 899–927.
 384. *Smagorinsky J.* General circulation experiment with the primitive equations. I. The basic experiment. – *Mon. Wea. Rev.*, 1963. – V. 91. – P. 99–164.
 385. *Storch H., Langenberg H., Feser F.* A spectral nudging technique for dynamical downscaling purposes. – *Mon. Wea. Rev.*, 2000. – V. 128. – P. 3664–3673.
 386. *Stensrud D.J.* Parameterization schemes. Keys to understanding numerical weather prediction models. – Cambridge University Press, 2007. – 450 p.
 387. *Stone H.* Parallel tridiagonal equation solvers. – *ACM Trans. Math. Software I.*, 1975. – P. 289–307.

388. *Su S.-W., Lai M.-C., Lin C.-A.* An immersed boundary technique for simulating complex flows with rigid boundary. – *Computers and Fluids*, 2007. – V. 36. – P. 313–324.
389. *Taylor M.A., Edwards J., Cyr A.St.* Petascale atmospheric models for the Community Climate System Model: new developments and evaluation of scalable dynamical cores. – *J. Phys.: Conference Series*, 2008. – V. 125. – P. 1–10.
390. *Takashi K., Peng X., Onishi R., Ohdira M., Goto K., Fuchigami H., Sugimuri T.* Multiscale simulator for the geoenvironment: MSSG and simulations. – In: Mozdzyński G. (ed). “Proceedings of the 12-th ECMWF workshop on the use of high performance computing in meteorology”, Reading, UK, 2007. – P. 36–54.
391. *Tao W.-K., Chern J.-D., Atlas R., Randall D., Khairoutdinov M., Li J.-L., Waliser D.E., Hou A., Lin X., Peters-Lidard C., Lau W., Jiang J., Simpson J.* A multiscale modeling system. – *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, 2009. – V. 90. – P. 515–534.
392. *Taylor G.I.* Eddy motion in the atmosphere. – *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 1915. – V. A215. – P. 1–26.
393. *Taylor G.I.* The transport of vorticity and heat through fluids in turbulent motion. – *Proc. Roy. Soc.*, 1932. – V. A135. – P. 685–706.
394. *Taylor P.A., Dyer K.R.* Theoretical models of flow near the bed and their applications for sediment transport. – In: *The Sea*, E.D. Colberg, Ed., Wiley-Interscience, New-York, 1977. – V. 6. – P. 579–601.
395. *Taylor M., Tribbia J., Iskandarani M.* The spectral element method for the shallow water equations on the sphere. – *J. Comput. Phys.*, 1997. – V. 130. – P. 92–108.
396. *Temperton C., Staniforth A.* An efficient two-time-level semi-Lagrangian semi-implicit integration scheme. – *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 1987. – V. 113. – P. 1025–1039.
397. *Terekhov K.M., Volodin E.M., Gusev A.V.* Methods and efficiency estimation of parallel implementation of the σ -model of general ocean circulation. – *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 2011. – V. 26. – P. 189–208.
398. *Thuburn J.* Some conservation issues for the dynamical cores of NWP and climate models. – *J. Comput. Phys.*, 2008, v. 227, p. 3715–3730.
399. *Thunis P., Bornstein R.* Hierarchy of mesoscale flow assumptions and equations. – *J. Atmos. Sci.*, 1993. – V. 53. – P. 380–397.
400. *Tiedtke M.* A comprehensive mass flux scheme for cumulus parameterization in large-scale models. – *Mon. Wea. Rev.*, 1989. – V. 117. – P. 1779–1800.
401. *Tolstykh M.A., Gloukhov V.N.* Implementation of global atmospheric models on parallel computers. – *Вычислительные технологии*, 2002. – Т. 7. – Спец. вып. – С. 101–109.
402. *Toselli A., Widlund O.* Domain decomposition methods. Algorithms and theory. – *Springer Series in Computational Mathematics*, 2004. – V. 34. – 450 p.
403. *Tseng Y.-H., Ferziger J.H.* A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. – *J. Comput. Phys.*, 2003. – V. 192. – P. 593–623.
404. *Udaykumar H.S., Mittal R., Rampunggoon P., Khanna A.* A sharp interface Cartesian grid method for simulating flows with complex moving boundaries. – *J. Comput. Phys.*, 2001. – V. 174. – P. 345–380.
405. *Varga R.* Matrix iterative analysis. – New Jersey: Prentice Hall, 1962. – 322 p.
406. *Vasilyev O.V., Lund T. S., Moin P.* A general class of commutative filters for LES in complex geometries. – *J. Comput. Phys.*, 1998. – V. 146. – P. 82–104.
407. *van der Vorst H.* Analysis of a parallel solution method for tridiagonal systems. – Department of Mathematics and Information Report No. 86-06, Delft University of Technology, 1986.
408. *van der Vorst H.A.* Iterative Krylov methods for large linear systems. – Cambridge: Cambridge University Press, 2003. – 221 p.

409. *Versegny D.L., McFarlane N.A., Lazare M.* CLASS - a Canadian land surface scheme for GCMs. II: vegetation model and coupled runs. – *Int. J. Clim.*, 1993. – V. 13. – P. 347–370.
410. *Verzicco R., Mohd-Yusof J., Orlandi P., Haworth D.* Large eddy simulation in complex geometric configurations using boundary body forces. – *The American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, 2000. – V. 38. – P. 427–433.
411. *Wamser C., Lykossov V.N.* On the friction velocity during blowing snow. – *Beitr. Phys. Atmosph.*, 1995. – V. 68. – P. 85–94.
412. *Warner T.T.* Numerical weather and climate prediction. – Cambridge University Press, 2011. – 550 p.
413. *Watterson I.G., Dix M.R., Colman R.A.* A comparison of present and doubled CO₂ climates and feedbacks simulated by three general circulation models. – *J. Geophys. Res.*, 1999. – V. 104. – P. 1943–1956.
414. *Wesseling P.* An introduction to multigrid methods. – New York: Wiley, 1992. – 284 p.
415. *Williamson C.H.K.* Oblique and parallel modes of vortex shedding in the wake of a circular cylinder at low Reynolds numbers. – *J. Fluid Mech.*, 1989. – V. 209. – P. 579–627.
416. *Willis G.E., Deardorff J.M.* A laboratory model of the unstable planetary boundary layer. – *J. Atmos. Sci.*, 1974. – V. 31. – P. 1297–1307.
417. *Winckelmans G.S., Jeanmart H.* Assessment of some models for LES without/with explicit filtering. – *Direct and Large-Eddy Simulation IV*, B. J. Geurts, R. Friedrich, and O. Métais, Eds. Kluwer, Dordrecht, Netherlands, 2001. – P. 55–66.
418. *WMO: World Meteorological Organization.* The Physical Basis of Climate and Climate Modelling. – GARP Publications, WMO, Geneva, 1975. – Series No. 16. (Физические основы теории климата и его моделирования/Перевод под ред. А.С. Мони́на. Л.: Гидрометеиздат, 1977).
419. *Wu Y.L., Shu C.* Application of local DFD method to simulate unsteady flows around an oscillating circular cylinder. – *Int. J. for Numerical Methods in Fluids*, 2008. – V. 58. – P. 1223–1236.
420. *Xie Z.-T., Castro I.P.* LES and RANS for turbulent flow over arrays of wall-mounted obstacles. – *Flow, Turbulence and Combustion*, 2006. – V. 76. – P. 291–312.
421. *Yang J.M., Balaras E.* An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries. – *J. Comput. Phys.*, 2006. – V. 215. – P. 12–40.
422. *Yang X., Zhang X., Li Z., He G.-W.* A smoothing technique for discrete delta functions with application to immersed boundary method in moving boundary simulations. – *J. Comput. Phys.*, 2009. – V. 228. – P. 7821–7836.
423. *Young D.* Iterative solution of large linear systems. – New York: Academic Press, 1971. – 570 p.
424. *Zang Y., Street R.L., Koseff J.* A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. – *Phys. Fluids A*, 1993. – V. 5. – P. 3186–3196.
425. *Zeman O., Lumley J.L.* Modeling buoyancy-driven mixed layers. – *J. Atmos. Sci.*, 1976. – V. 33. – P. 1974–1988.
426. *Zilitinkevich S.S.* Comments on numerical simulation of homogeneous stably stratified turbulence. – *Bound. Layer Meteorol.*, 2010. – V. 136. – P. 161–164.
427. *Zilitinkevich S.S., Gryanik V.M., Lykossov V.N., Mironov D.V.* Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers. – *J. Atmos. Sci.*, 1999. – V. 56. – P. 3463–3477.

Lomonosov Moscow State University

**V.N. Lykossov, A.V. Glazunov, D.V. Kulyamin,
E.V. Mortikov, V.M. Stepanenko**

Supercomputer Modeling in Physics of the Climate System

Manual

In the book basic grounds of constructing mathematical models for solving problems of the climate system physics are stated, methods of their discrete approximation and main numerical algorithms arising thus are given, supercomputer technologies of numerical realization of models are discussed. By way of illustration stated approaches the following problems are considered: modeling of a flow of viscous incompressible fluid in domains of a complicated configuration, large-eddy simulation of geophysical boundary layers dynamics, modeling of regional features of atmospheric circulation, reproduction of the present-day climate and an assessment of its possible change in the future. The book is intended for experts in the field of sciences about the Earth climate system, teachers, graduated students and can be used as the tutorial for students of natural-science specialities.

Key words: climate system, climate, climate change, large-scale processes, mesoscale processes, geophysical turbulence, mathematical modeling, large-eddy simulation, numerical model, parallel calculations, parallel programming, supercomputer technologies.

CONTENTS

Introduction	4
Chapter 1. Mathematical modeling as a basis for investigation of climate processes	12
1.1. Main components of the climate system and their interactions.....	13
1.2. Basic principles of constructing geophysical models	24
1.3. Hydro- and thermodynamics governing equations of large-scale processes.....	28
1.4. Vertical coordinates	34
1.5. Separation of scales and regional models	42
1.6. Large-eddy simulation of turbulence.....	56
Chapter 2. Parameterization of subgrid-scale processes	70
2.1. Boundary layer of the atmosphere.....	70
2.2. Exchange processes in the near-surface atmospheric layer	82
2.3. Interaction of atmosphere with land and cryosphere.....	88
2.4. Atmospheric chemistry and radiation	96
2.5. Cloudiness and convection	103
2.6. Gravity-wave drag and ionic friction	113
Chapter 3. Computational technologies	119
3.1. Basic methods for discretization of mathematical physics equations	119
3.2. Some computational aspects of modeling climate processes.....	129
3.3. An example of constructing computational technology for modeling local circulation	141
3.4. Specificity of computational technology for domains of a complicated geometry.....	154
Chapter 4. Parallel algorithms and programming	160
4.1. Supercomputer as a tool for numerical modeling in physics of the climate system.....	160
4.2. Technologies of parallel programming	164
4.3. Implementation of models on computational systems with shared memory	176
4.4. Direct methods for solving systems of linear algebraic equations	180
4.5. Iterative methods.....	188
4.6. Scalability problem on different computational architectures	206
Chapter 5. Examples of application of supercomputer technologies in problems of the climate system physics.....	212
5.1. A flow of viscous incompressible fluid in domains of a complicated configuration	212
5.2. Large-eddy simulation of geophysical boundary layers	224
5.3. Mesoscale processes.....	243
5.4. Modeling of climate and climate change.....	253
Conclusion.....	266
References.....	268

Учебное издание

Лыкосов Василий Николаевич, Глазунов Андрей Васильевич,
Кулямин Дмитрий Вячеславович, Мортиков Евгений Валерьевич,
Степаненко Виктор Михайлович

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ КЛИМАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Редактор *М.С. Кутасова*
Оформление переплета
П.А. Брызгалов, Ю.Н. Симоненко
Верстка *А. Губин*

Подписано в печать 11.07.2012
Формат 70х100/16. Гарнитура Times.
Офсетная печать. Бумага офсетная № 1.
Усл. печ. л. 32,90. Тираж 2000 экз.
Изд. № 9660. Заказ № 963.

Ордена «Знак Почета»
Издательство Московского университета
125009, Москва, ул. Б. Никитская 5/7.

Тел.: 629-50-91. Факс: 697-66-71
939-34-93 (отдел реализации)
E-mail: secretary-msu-press@yandex.ru

Сайт Издательства МГУ:
www.msu.ru/depts/MSUPubl2005

Интернет-магазин: <http://msupublishing.ru>

Адрес отдела реализации:
Москва, ул. Хохлова, 11 (Воробьевы горы, МГУ)
E-mail: izd-mgu@yandex.ru Тел.: (495) 939-34-93

Отпечатано в ППП «Типография “Наука”»
121099, Москва, Шубинский пер. 6

В книге излагаются базовые основы построения математических моделей при решении задач физики климатической системы, приводятся методы их конечномерной аппроксимации и возникающие при этом основные численные алгоритмы, обсуждаются суперкомпьютерные технологии численной реализации моделей. В качестве иллюстрации изложенных подходов рассматриваются: задача моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации, проблема вихреразрешающего воспроизведения динамики геофизических пограничных слоев, задача моделирования региональных особенностей атмосферной циркуляции, проблема воспроизведения современного климата и оценки его возможных в будущем изменений. Книга рассчитана на специалистов в области наук о климатической системе Земли, преподавателей, аспирантов и может быть использована в качестве учебного пособия для студентов естественнонаучных специальностей.

Лыкосов Василий Николаевич, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, главный научный сотрудник Института вычислительной математики РАН; по совместительству: заведующий лабораторией суперкомпьютерного моделирования природно-климатических процессов Научно-исследовательского вычислительного центра и профессор кафедры вычислительных технологий и моделирования факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова.	Глазунов Андрей Васильевич, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института вычислительной математики РАН и, по совместительству, старший научный сотрудник лаборатории суперкомпьютерного моделирования природно-климатических процессов Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.
Кулямин Дмитрий Вячеславович, к.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории суперкомпьютерного моделирования природно-климатических процессов Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.	Мортиков Евгений Валерьевич, младший научный сотрудник лаборатории суперкомпьютерного моделирования природно-климатических процессов Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.
Степаненко Виктор Михайлович, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории суперкомпьютерного моделирования природно-климатических процессов Научно-исследовательского вычислительного центра и, по совместительству, научный сотрудник кафедры метеорологии и климатологии географического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.	



Издательство
Московского
университета

ISBN 978-5-211-06341-9



9 785211 063419