

舍入误差对大气环流模式模拟结果的影响

王鹏飞¹ 王在志² 黄刚¹

1 中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室, 北京 100029

2 国家气候中心, 北京 100081

摘要 此文旨在研究气候数值模式的长期计算时受舍入误差的影响。通过对大气环流谱模式 SAMIL 采用不同 CPU 数计算时获得的长时间积分结果进行分析, 发现使用不同 CPU 数进行单精度计算时, 其十年平均月平均 500 hPa 高度场随机误差在正负 6~8 gpm 范围内, 而使用双精度计算时相应的误差为正负 3~4 gpm。对于气候平均场而言, 作者的试验表明 SAMIL 在并行计算时由于计算顺序改变而引起的误差在可接受范围之内。然而, 虽然舍入误差的全球平均值不大, 但其误差分布的差别范围并不小。数值试验得到的不同模拟结果之间误差大小与模拟结果的自身年际变化大小在同样的量级, 因此对于“年际变化”这样的问题来说, 其影响是不可忽略的, 必须要使用集合预报的办法来减小误差的影响。文中列出了 3 种研究复杂数值模式舍入误差的实验方法, 指出其一定条件下的等效性和不同适用范围, 对于其他模式的舍入误差影响研究有一定的参考价值。在舍入误差分析的基础上, 介绍了一种新型的专门针对舍入误差的集合预报方法(舍入误差平均集合, RME), 指出了其在气候模拟研究中的应用价值。

关键词 大气环流模式 舍入误差 计算精度 误差研究方法 集合预报

文章编号 1006-9895(2007)05-0815-11

中图分类号 P435

文献标识码 A

The Influence of Round-off Error on the Atmospheric General Circulation Model

WANG Peng-Fei¹, WANG Zai-Zhi², and HUANG Gang¹

1 *State Key Laboratory of Numerical Modeling for Atmospheric Sciences and Geophysical Fluid Dynamics, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029*

2 *National Climate Center, Beijing 100081*

Abstract Round-off error has an influence on the numerical model computations. It is easy to determine the differences between the results of the model SAMIL with different CPUs. After the analysis of the ten-year integration of SAMIL, the error range of global mean height at 500 hPa is determined; it is also found that the global mean height error is decreased at the same level using double precision. The experiment described in the paper proves that the error that arises out of the change in computation sequence is acceptable and that the double-precision computation can help reduce the computing error. Though the global mean error is not very large, the standard error of the difference is not small, and it can be estimated by the experiments in the paper. The estimation shows that it has the same magnitude as the annual change of the simulation results. Therefore, the distribution of mean error cannot be ignored when the model is used to study such cases as annual climate change. In this paper, three different methods adopted to analyze the round-off errors of a complicated numerical model are listed. The equivalence of the three un-

收稿日期 2006-04-19 收到, 2006-09-13 收到修改稿

资助项目 中国科学院知识创新工程重要方向项目 KZCX-YW-220, 中国科学院知识创新工程领域前沿项目 IAP07119, 南京信息工程大学江苏省气象灾害重点实验室开放课题 KJS0601, 中国气象局业务专项项目 BROP200709

作者简介 王鹏飞, 男, 1973 年出生, 硕士, 高级工程师, 主要从事数值模式并行计算、非线性可预报性、数值分析、大气科学数据信息系统等方面的研究。E-mail: wpf@mail.iap.ac.cn

der some conditions is discussed in the paper, as well as their particular applicability conditions. Moreover, the authors introduce a new type of ensemble forecast (RME, Round-off error Mean Ensemble) method to decrease round-off error in climatic study. These methods may be helpful to users who want to analyze the influence of round-off errors of other numerical models.

Key words atmospheric general circulation model, round-off error, computing precision, error analysis method, ensemble forecast

1 引言

在数值模式的研究中,不仅要求其动力框架、物理过程等尽量准确,而且对数值模式的计算过程也需要检验。在计算过程中存在各种随机的误差,这些随机误差是影响模拟结果的一个重要因素。Miyakoda 等^[1]的研究表明可预报的能力不仅依赖于误差的增长速率而且有着明显的区域分布,随后 Shukla^[2]、Kalnay 等^[3]和 Dalcher 等^[4]的进一步研究发现误差的变化和增长与纬度、季节、尺度分布有明显的函数关系。Reynolds 等^[5]通过研究 National Meteorological Center (NMC) 的中期预报模式中随机误差的增长,发现模式的随机误差增长可以分为内部误差 (internal errors) 和外部误差 (external errors) 两部分,并且通过数值实验研究了内部与外部误差的具体分布形式。随机误差的产生原因很多,既可能是由于求解问题的非线性造成误差的增长,也可能是由模式偏差造成误差的增长。在实际的浮点计算环境中,舍入误差是随机误差的一个重要来源,由于浮点舍入误差的存在,数值模式的模拟结果会受到一定的影响。

对于那些基本由初值决定的简单数值模式系统,舍入误差对模拟结果的影响已经有过一些研究。例如,李建平等^[6,7]和王鹏飞等^[8]进行的数值实验表明:在单精度和双精度计算条件下,舍入误差对非线性系统的计算有着重要的影响。而且王鹏飞等^[8]对于简单的数值模式详细讨论了预报期限对计算精度和计算步长等的依赖关系。

复杂的数值模式中舍入误差是否会对模拟结果产生影响,如何产生影响,以及产生多大的影响是值得研究的问题。早在 1969 年, Walter^[9]使用简单的两层预报模式,研究过舍入误差在模式积分中的影响。Williamson 等^[10]在 1973 年使用 NCAR 早期的 GCM 预报模式,研究过舍入误差对模拟结果的影响。这两项研究进行较早,其使用的计算机

和计算标准比较老。随着计算机技术的发展,特别是 20 世纪 70 年代后,IEEE-754 浮点计算标准成为各计算机系统平台的浮点计算标准。Rosinski 等^[11]在 1997 年对 NCAR 通用气候模式 (CCM2) 所受的舍入误差影响进行了研究,提供了检测计算结果差别程度的方法。Janakiraman 等^[12]在研究 T80L18 模式的过程中,发现 T80L18 的模拟结果对于不同的计算机系统和环境很敏感,经过研究发现该模式在并行计算过程中使用到累加 (MPI-ALLREDUCE) 时,不能保证累加次序每次都相同,从而影响了最终的结果。

从上述研究中可以看出,舍入误差对气候数值模式的长期计算存在影响,但不同的模式影响程度可能不一样。因为有了舍入误差的影响,导致气候模式在不同的计算条件下产生不一样的结果,即模式自身的结果之间出现了不自洽的问题。为了系统地研究数值模式的长期计算时舍入误差的影响,我们利用一个实际的大气环流模式 SAMIL (Spectral Atmosphere Model of IAP/LASG) 进行了一系列舍入误差数值试验研究。这些研究包括:并行/串行模拟结果差异、单/双精度模拟结果差异、不同种计算机之间的差异等。

本文所进行的实验适用范围较广,不仅可以对 SAMIL 模式,还可以对常见的各种气候数值模式进行,当然具体的模式其实现的细节可能略有差异。

2 SAMIL 模式简介

SAMIL^[13~15]是在中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室 (简称 LASG) 发展改进的大气环流气候谱模式,其最早的版本由澳大利亚墨尔本大学引入,分辨率为 R15L9。经过多年的发展,在模式的动力过程、物理方案方面做了许多调整,如引入参考大气、与简化的简单生物圈陆面模式耦合等。近年来提高了其

水平和垂直分辨率, 并从模式的标准化、模块化、并行化的要求对模式作了进一步的发展; 特别是通过模块化过程, 对不同的物理过程可引入多个处理方案, 这样可以在同一个模式框架下方便地实现不同方案的比较。对 SAMIL 的基本模拟特征已有了初步的分析^[13, 14], 模式对亚洲季风也有较好的模拟能力^[16]。

在模式是可用的以及正确的前提下, 通常人们认为: 模式的串行和并行计算结果之间的差异不应该很大; 模式在使用单精度计算和双精度计算时, 结果差异不应该很大; 模式在不同的计算机系统中运行时, 模拟结果不应该差异过大。下面的数值试验将从这几个方面入手, 系统地进行舍入误差影响程度的定量研究。

3 数值试验与结果

利用 SAMIL 模式进行了 3 组试验, 分别研究由于计算顺序改变、不同计算精度及不同计算机系统等引起的舍入误差对模拟结果的影响。试验时首先将 SAMIL 模式按照单精度编译, 分别使用 1、3、6、9、18 个 CPU 进行计算, 分别记为 C1、C3、C6、C9、C18, 获得输出结果, 然后再按双精度编译取得相应数据。对不同精度的 SAMIL 模式, 选择分辨率分别为 R42L9 和 R42L26, 每个数值试验计算 10 年, 然后对不同实验的月平均结果来进行分析。为比较差异的显著性, 对比较的结果做了 t 显著检验, 信度水平为 0.05。

另外, 为了衡量计算结果的差别, 定义表示模拟结果差别程度的量为 RMS (Root Mean Square, 空间均方根误差):

$$Z_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N [Z_1(i, j) - Z_2(i, j)]^2}{MN}}$$

其中, M 、 N 为纬圈、经圈方向的网格数, Z_1 、 Z_2 为两次试验 (比如一个是 C18, 一个是 C1) 中的 500 hPa 位势高度场 (可以对不同的气候场计算 RMS, 作为说明问题的例子, 本文仅选取 500 hPa 位势高度场的结果计算 RMS 进行比较)。

为了研究舍入误差对模式模拟结果的年际变化的影响程度, 给出两种计算方式所得结果的时间均方根误差与各自年际变化大小的比值, 定义如下:

$$r_1 = \frac{E_Z}{\sigma_{Z1}}, r_2 = \frac{E_Z}{\sigma_{Z2}}$$

其中,

$$E_Z = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Z_1(i) - Z_2(i)]^2}$$

为两种试验 (比如一个是 C18, 一个是 C1) 之间的年际差别, i 是年份,

$$\sigma_{Z1} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Z_1(i) - \bar{Z}_1]^2}$$

和

$$\sigma_{Z2} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Z_2(i) - \bar{Z}_2]^2}$$

分别是两种算法各自结果的年际变化大小。

3.1 计算顺序对结果的影响

在 SAMIL 大气环流模式的并行计算过程中, 由于按纬圈分解计算任务时改变了勒让德函数变换中傅氏系数累加的次序^[17], 会导致模拟结果的差别。这种表面看来是由于计算顺序改变引起的结果变化, 其本质是由于计算机浮点计算舍入误差造成的。本节主要检查并行和串行模拟结果差别的程度。

200 hPa 高度场的误差情况与 500 hPa 高度场的误差情况类似, 下面的讨论以 500 hPa 高度场为例。图 1 给出了分辨率为 R42L26 的 SAMIL 模式, 并行节点分别取 3、6、9、18 时与 1 个 CPU 运行 500 hPa 高度场的全球平均误差和 RMS 逐月分布, 同时也给出了全年平均的误差值。从平均误差 (图 1a) 来看, 多个 CPU 时的结果与串行结果的差值有正也有负, 误差都在 6 gpm 以内; 而误差的平均值较小, 多数在 1 gpm 以下; 从误差分布看呈现随机分布特征, 即不随 CPU 数目的增加而增加或减少, 与 CPU 个数之间没有明显关系。在 RMS 分布上 (图 1b) 各个结果接近, 差别基本在 15~30 gpm 之间, 除 1 月份以外, 其他季节的 RMS 在 17 gpm 左右, 变化不大。

图 1c、d 分别为单个 CPU 与 18 个 CPU 计算结果之间的时间均方根误差与它们各自年际方差的比值 r_1 、 r_2 的分布图, 从实际计算的结果来看, r_1 、 r_2 的大小超过 0.5 甚至 1.0 的区域很大, 这表明在很大的区域内, 计算误差的量级达到甚至超过了模拟结果自身年际变率的大小, 因此对于某些特定的问题进行研究时要注意舍入误差带来的不确定性

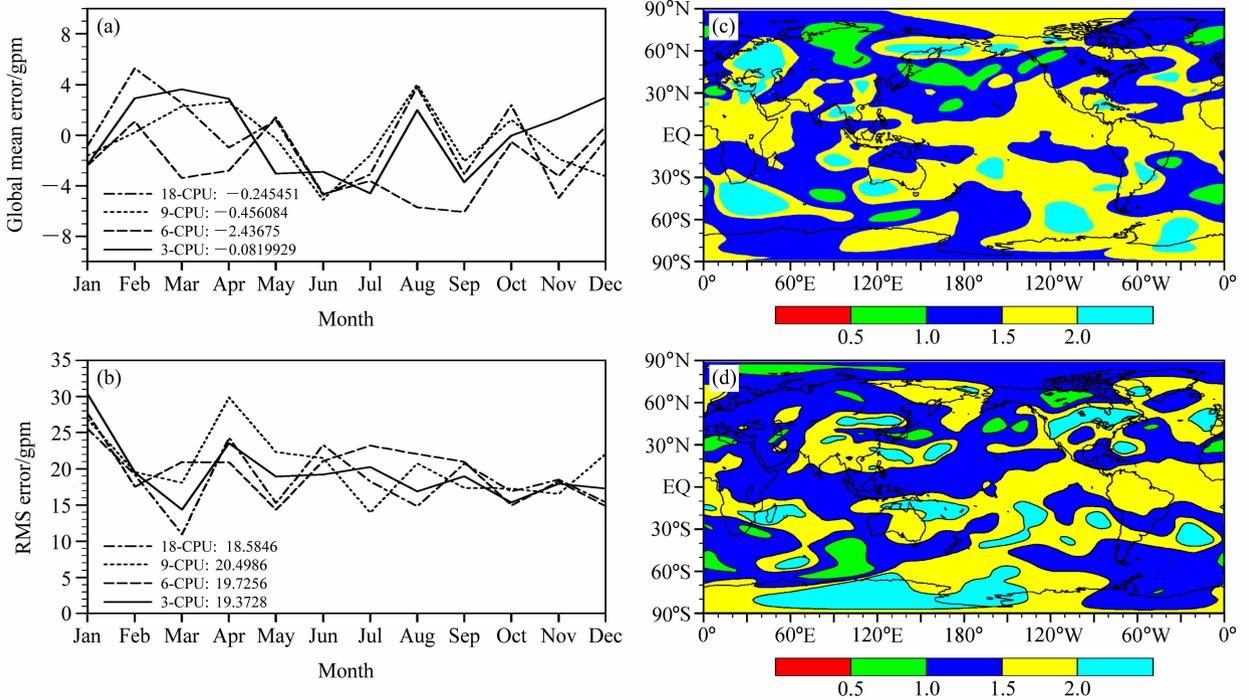


图 1 SAMIL 模式 (R42L26) 多 CPU 与单 CPU 运行时 500 hPa 高度场 (单位: gpm) 结果比较: (a) 全球平均误差逐月分布; (b) RMS 误差逐月分布; (c) 单 CPU 与 18 个 CPU 计算结果的时间均方根误差与单 CPU 计算结果年际变化大小的比值; (d) 单 CPU 与 18 个 CPU 计算结果的时间均方根误差与 18 个 CPU 计算结果年际变化大小的比值。图 a、b 图例右边的数字是对应误差的全年平均

Fig. 1 500 hPa height difference between multiple and single CPU results simulated by SAMIL (R42L26): (a) The monthly global mean error; (b) monthly RMS error; (c) the ratio of the time RMS error between the single CPU and 18 CPU results to the interannual variation of the single CPU result; (d) the ratio of the time RMS error between the single CPU and 18 CPU results to the interannual variation of the 18 CPU result. The decimal fractions in (a) and (b) are the annual mean errors

(对模式其他分辨率的结果和不同计算条件下的模拟结果, 我们都绘制了 r_1 、 r_2 的分布图, 影响区域范围与本例相似, 为了节省篇幅, 略去后面的 r_1 、 r_2 图)。

图 2 是 500 hPa 高度场的空间分布, 这里只给出采用 1 个 CPU 和 18 个 CPU 时第 10 年 12 月份的平均分布。从图 2 中可以看出主要系统的分布一致, 但系统强度则存在一定差别, 尤其在中高纬的差异比较明显。采用 1 个 CPU 时 (图 2a), 北半球是比较平直的纬向型分布; 采用 18 个 CPU 的分布 (图 2b) 则表现为经向型分布, 北极低压系统较强。东亚大槽、北美大槽的强度有明显差异, 在亚洲东岸和北美东岸的急流强度也有很大的差别。在南半球中高纬都以平直气流为主, 但在极区的差别也十分明显。南极地区也是目前气候模拟中差异比较大的区域。中高纬大气受大气内部动力过程影响大, 由此对计算过程中的误差表现出更大的不确定性。而热带大气对外强迫的响应明显, 计算误差造成的

直接影响小。但由于热带降水的差异 (图略), 使得 500 hPa 高度场的分布在热带同样有一些差别。这些虽是模式模拟一年的结果, 而且差别仅由并行引起的计算顺序改变引起, 但从中也可以反映目前气候预测及研究中的一些问题。这也说明了短期气候预测的难度, 除了受初始场及外强迫的影响外, 模式中的算法对模拟结果也带来很大的不确定性。

图 3a、b 是模式分辨率取 R42L9 时的比较结果, 与图 1 类似, 这里也给出并行与单 CPU 结果 500 hPa 高度场的全球平均误差和 RMS。从全球平均的分布看, 由于并行引起的误差不算大, 而且各月变化无明显规律, 这与分辨率为 R42L26 类似 (图 1)。全年平均误差在 2.2 gpm 以下, 与 R42L26 的结果 (图 1a) 接近, 这也表明误差的随机分布特征, 但除了夏季以外, 其他月份的 RMS 约 15 gpm, 比 R42L26 的结果略小 (图 1b), 因此 RMS 的变化幅度与模式的分辨率有关。

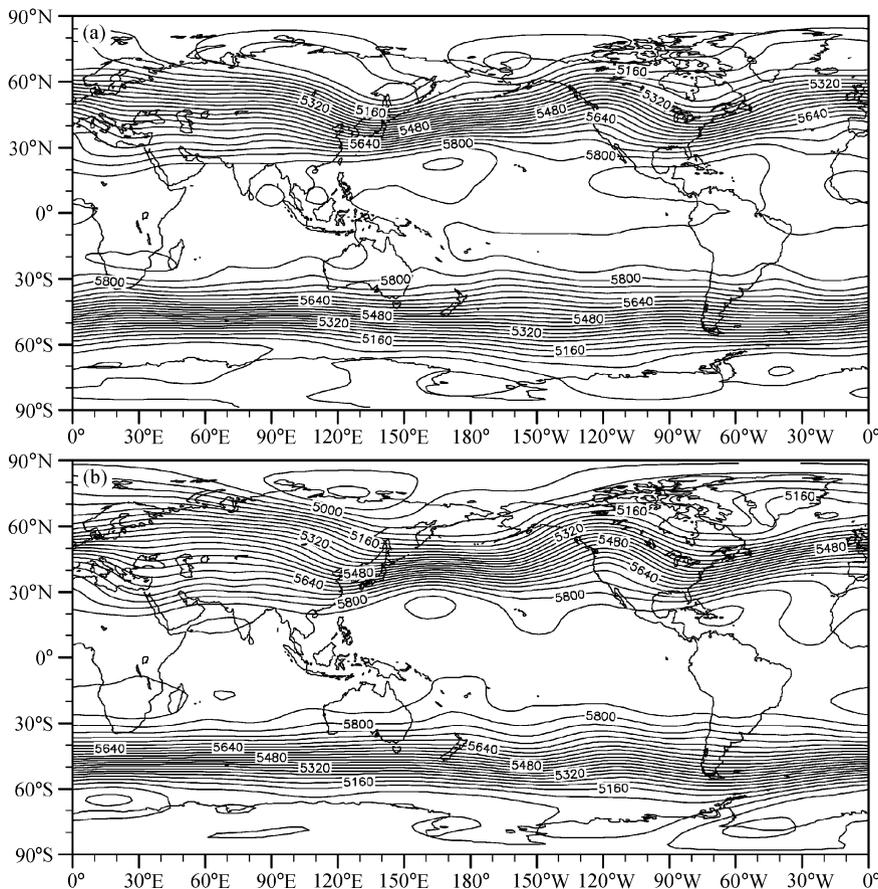


图2 模式模拟的第10年12月份500 hPa月平均高度场：(a)单CPU计算的结果；(b)18个CPU的计算结果。等值线间隔：40 gpm
 Fig. 2 Simulated monthly mean 500 hPa height in Dec of the 10th model year with single CPU (a) and 18 CPU (b). The contour interval is 40 gpm

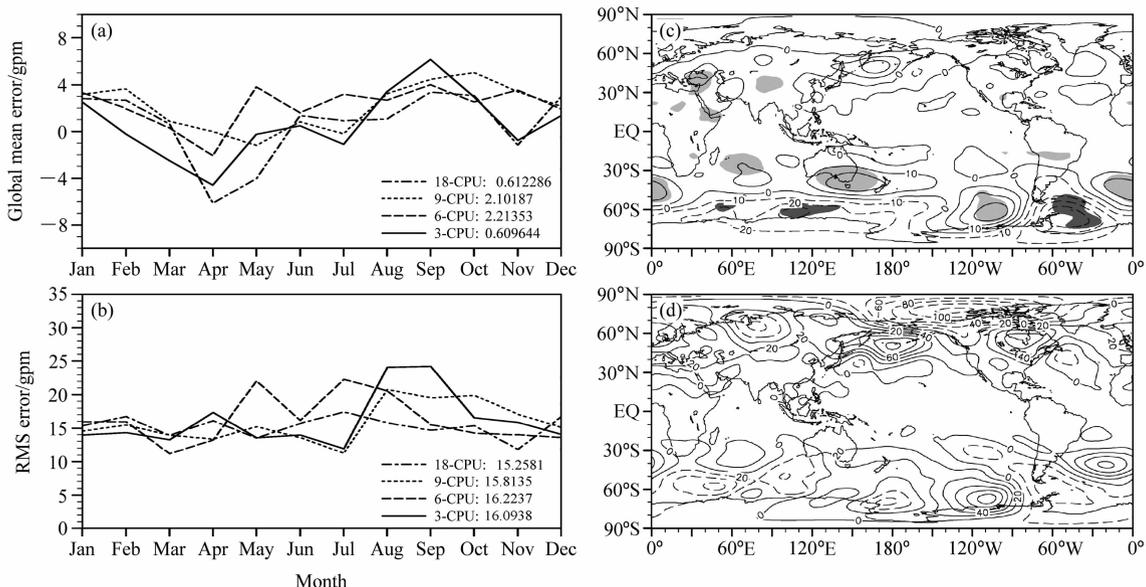


图3 SAMIL 模式 (R42L9) 多CPU与单CPU运行500 hPa高度场(单位: gpm)结果比较：(a)全球平均误差逐月分布；(b)RMS误差逐月分布；(c)多年夏季平均误差(阴影为差异显著区，信度水平为0.05)；(d)第10年夏季平均误差。(a)、(b)图例右边的数字是误差的全年平均
 Fig. 3 500 hPa height difference (gpm) between multiple and single CPU results simulated by SAMIL (R42L9): (a) The monthly global mean error; (b) monthly RMS error; (c) the difference for multi-year Jun-Aug mean (The significant difference is shaded, the significance level is 0.05); (d) the difference for the Jun-Aug mean of the 10th model year. The decimal fractions in (a) and (b) are the annual mean errors

图 3c 给出了 10 年平均的夏季 500 hPa 高度场 18 个 CPU 并行与单 CPU 串行结果的差别分布, 图中阴影表示差异显著区。从图 3c 看, 中高纬差别比较大, 低纬比较小, 模式在中高纬对计算误差比较敏感。但差异仅在很小的范围内通过显著性检验, 因此这两个结果基本是一致的, 计算误差对气候系统的分布形势及模式的性能没有带来本质的影响。

图 3d 给出了第 10 年的夏季 500 hPa 高度场并行与单 CPU 结果的差别分布, 可以看出单独比较一年的结果时, 两者数值相差较大, 在 $-120 \sim 100$ gpm 之间。这表明在使用气候模式研究年际变化时, 舍入误差是有一定影响的。

前面比较的都是在单精度计算的情况下由于并行带来的计算顺序对模式结果的影响。当使用双精度计算时, 模式使用不同 CPU 数时计算结果的差异与单精度情况类似。图 4 和图 3 类似, 差别是模式采用双精度计算。图 4 的结果也与图 3 类似, 如各月全球平均误差在 5 gpm 以下 (图 4a), 夏季差异显著区很小 (图 4c) 等。从图 4 也可以看出, 使用双精度计算时, 不同 CPU 数计算结果的误差值要小一些, 如全年平均误差在 1.5 gpm 以下 (图 4a)。特别是从图 4d 可以看出, 使用双精度计算时, 第 10 年夏季 500 hPa 高度场的差别分布数值在

$-80 \sim 60$ gpm 之间, 稍小于图 3d 的结果。不过从空间分布看, 夏季气候平均的差异程度都不显著 (图 3c、图 4c)。

3.2 不同计算精度结果的差异

上一小节讨论的是由于采用不同的 CPU 个数对模式结果的影响。本节讨论在使用相同 CPU 数运算的情况下, 模式采用不同计算精度对模式结果的影响。图 5 给出了分辨率为 R42L26、模式分别采用 1 个和 18 个 CPU 时, 模拟单精度与双精度结果的差别。从图 5 可以看出, 双精度的结果与单精度的结果有一定差异, SAMIL (R42L26) 500 hPa 高度场双精度计算与单精度计算结果的平均差别在 8 gpm 范围内 (图 5a), RMS 在 $15 \sim 40$ gpm 范围内 (图 5b), 此时平均误差相对于 500 hPa 的位势高度平均值差别 0.2% 左右。全球平均差值比单纯由计算顺序产生的差别大 (图 1), 表明计算精度对模式结果的影响更大。从误差空间分布看也是中高纬差别大, 且通过差别显著性检验的区域小, 但当采用 18 个 CPU 时在热带大西洋和北美东北部有显著差异区, 表明计算精度引起的误差比较复杂。

图 6 是模式分辨率为 R42L9 时单精度和双精度试验的结果比较。此时, 全球平均差别及平均绝对差别都比较小, 与前面改变计算顺序的结果类似 (图 3、4)。但空间分布则不一样, 当采用 1 个 CPU

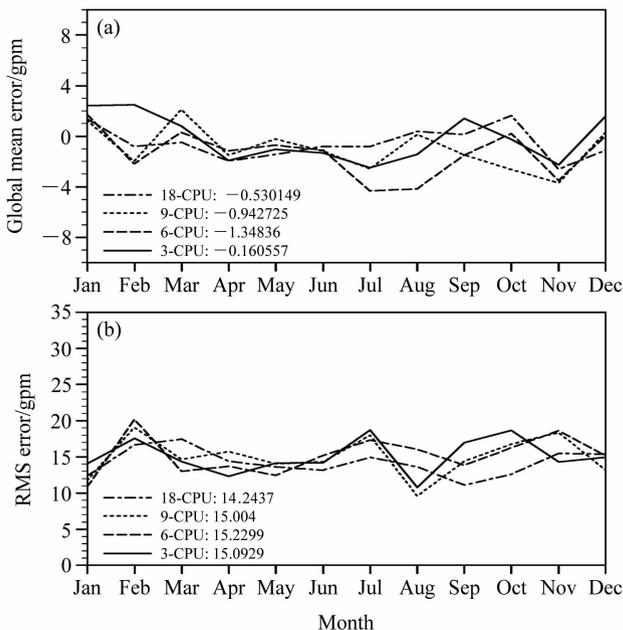
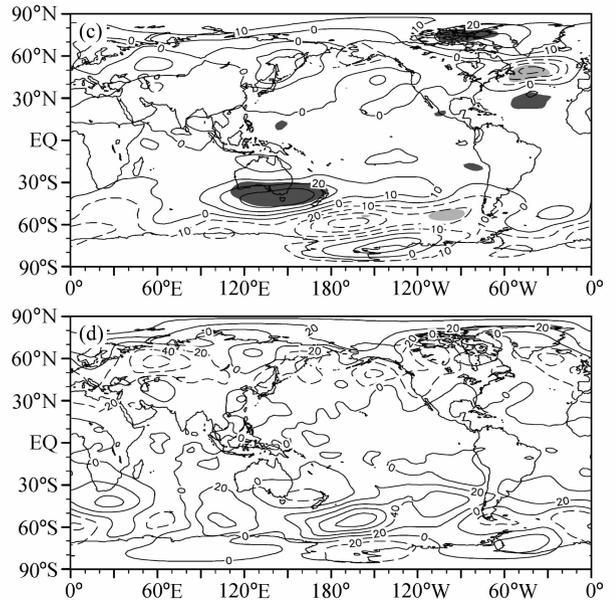


图 4 同图 3, 但采用双精度计算

Fig. 4 Same as Fig. 3, but with double precision



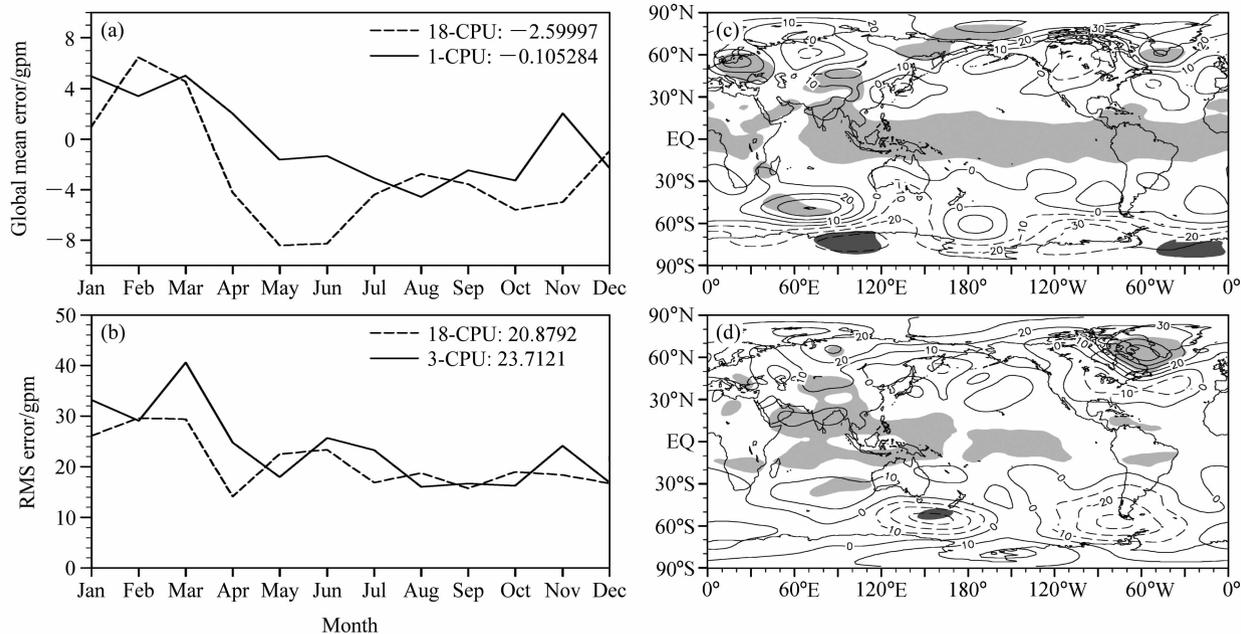


图 5 SAMIL (R42L26) 不同计算精度 500 hPa 高度场差别 (单位: gpm): 单 CPU 和 18 个 CPU 计算时单精度和双精度结果的逐月全球平均误差 (a) 和 RMS 误差 (b); 单 CPU (c) 和 18 个 CPU (d) 10 年夏季平均差别, 阴影为差异显著区, 信度水平为 0.05

Fig. 5 500 hPa height difference (gpm) between single and double precision with model SAMIL R42L26; The monthly global mean error (a) and RMS error (b) for single CPU and 18 CPU simulation results, the decimal fractions are the annual mean errors; the 10-year Jun-Aug mean difference for the single CPU (c) and 18 CPU (d) simulation results, the significant difference is shaded, the significance level is 0.05

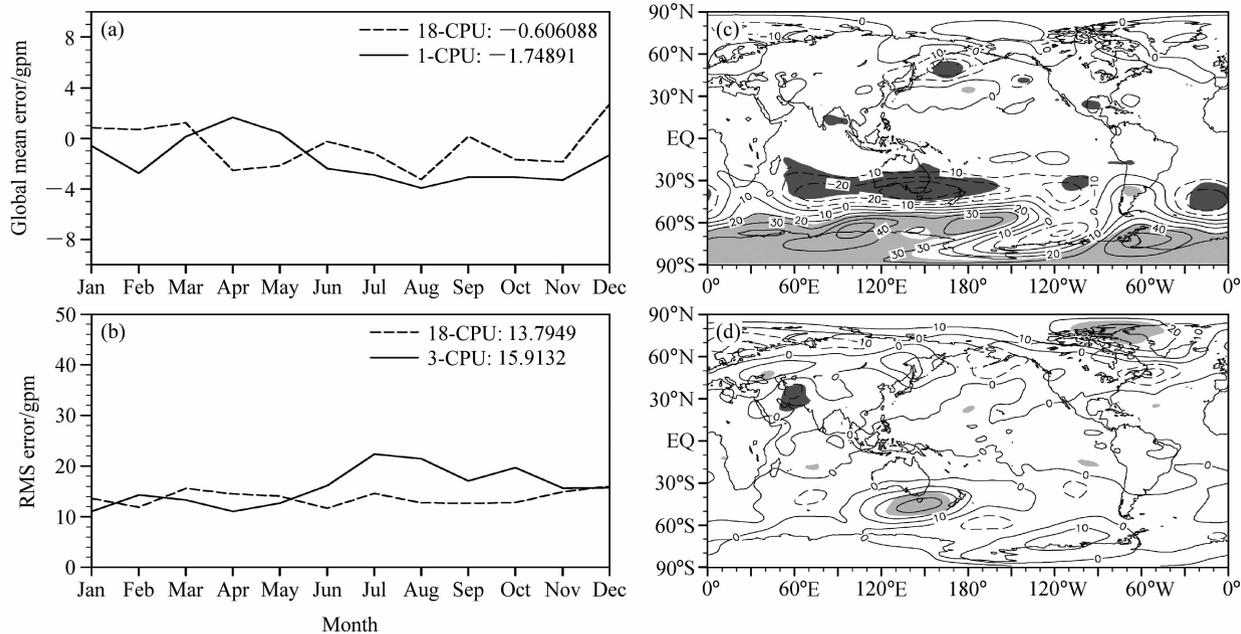


图 6 同图 5, 但模式为 SAMIL (R42L9)

Fig. 6 Same as Fig. 5, but with model SAMIL R42L9

时南半球存在显著的差别区 (图 6c), 采用 18 个 CPU 时显著差别区域则比较小 (图 6d)。

比较图 5 和图 6 的结果, 表明模式分辨率不

同, 计算精度带来的差别也不同。双精度与单精度的差别在量值上与分辨率没有明确关系, 但在 R42L9 中, 空间分辨率比较粗, 精度造成的差别相

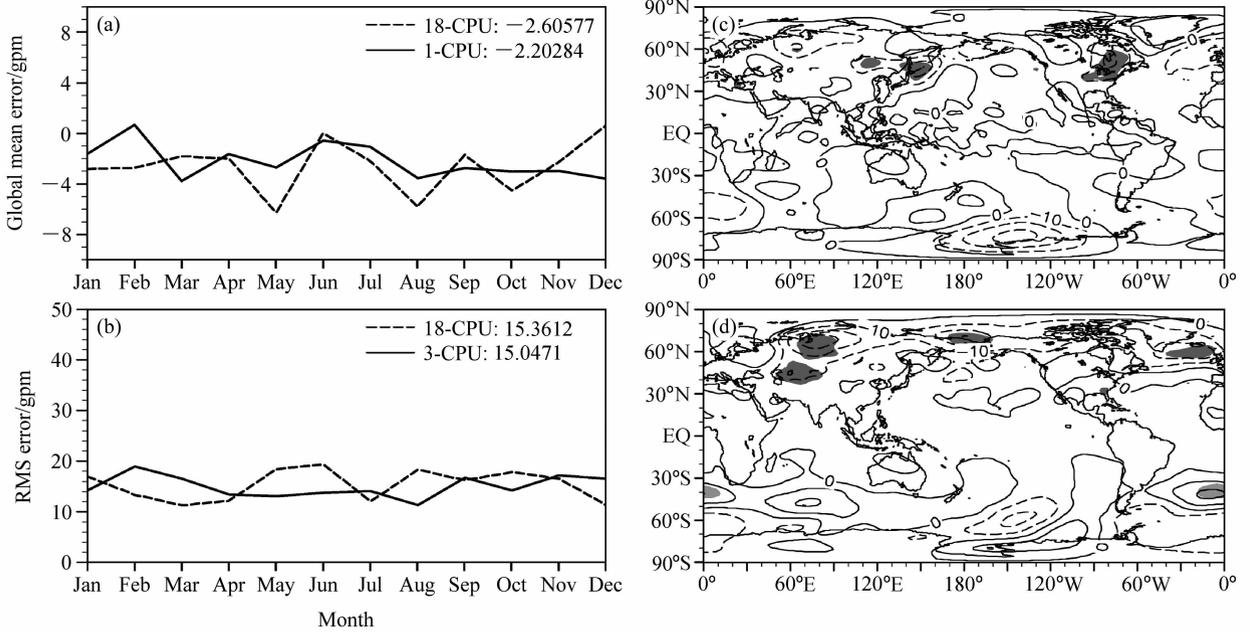


图7 同图5, 但模式为SAMIL (R42L9), 且在不同计算机系统(AIX和PC)上的差别

Fig. 7 Same as Fig. 5, but for the difference between different platforms (AIX and PC) with model SAMIL R42L9

对R42L26要小, 因此精度造成的影响也小。另外, R42L9的时间步长也比R42L26长, 积分相同时间积分步数也多, 累计的误差也大。由于图5和图6都是相同分辨率模式结果的比较, 差异更多反映舍入误差的累计, 因此分辨率高则差别会增大。

3.3 不同计算机系统计算结果的差异

不同计算机系统由于编译系统、浮点截断的处理方式等不同, 使相同模式计算的结果也产生差异, 这也是模式在移植过程中经常会碰到的问题。本小节主要讨论SAMIL模式分别在联想PC集群和IBM P690上的结果差异。联想PC集群采用的是Intel Xeon处理器和intel编译器, IBM P690使用的是POWER 4处理器, 编译器为xlf, 虽然它们都支持单精度和双精度计算, 但系统在处理浮点运算时存在一定差别, 因此即使使用相同的CPU个数和计算精度, 两套系统得到的计算结果还是有差别。

图7是模式分辨率为R42L9时P690和PC集群中单精度试验的结果比较。在不同的计算机系统中, 图7a、b计算结果的差别情况与前面不同计算精度的结果相似(图6a、b)。图7c、d中 t 检验的结果表明P690和PC集群中的计算结果没有显著性差别。

从图7c、d中可以看出10年平均JJA时差别的量级在-30~15之间, 这个数值比单独1年的JJA差别-100~100(图略)要小, 说明气候模拟时多年平均的结果受舍入误差的影响比单独年份的结果要小。

4 分析

根据舍入误差的理论, 在存在舍入误差的情况下, 交换律不再成立, 正是这个原因导致了不同计算顺序时得到的计算结果不同。但对于SAMIL模式来说, 从物理上看, 其并行计算时调整计算顺序对结果不会造成本质上的不同。

(1) 首先, 可以分析一下不同个数CPU计算时的情况: 以位势高度场 Z 为例进行分析, 当使用同样的初始条件计算, 仅CPU数不同时,

$$\begin{cases} \tilde{Z}_{c1}(t) = Z(t) + E_T(t) + E_{rc1}(t), \\ \tilde{Z}_{c2}(t) = Z(t) + E_T(t) + E_{rc2}(t), \end{cases} \quad (1)$$

其中, \tilde{Z}_{c1} 和 \tilde{Z}_{c2} 为实际的计算值, Z 为理论值, $E_T(t)$ 为计算方法产生的离散误差, $E_{rc1}(t)$ 和 $E_{rc2}(t)$ 为舍入误差。 \tilde{Z}_{c1} 和 \tilde{Z}_{c2} 是可以知道的, 而 Z 、 $E_T(t)$ 、 $E_{rc1}(t)$ 和 $E_{rc2}(t)$ 是未知的。

由于使用不同个数的CPU并行计算时, 算法的离散误差 $E_T(t)$ 是相同的, 对于相同的 t 时刻,

公式 (1) 中两式相减, 得

$$\tilde{Z}_{c1} - \tilde{Z}_{c2} = E_{rc1} - E_{rc2}. \quad (2)$$

一般随机误差 E_{rci} 等满足正态分布, 则当 E_{rc1}, \dots, E_{rcn} 个数很多时, 有 $\sum E_{rci} \rightarrow 0$, 此时可以得到:

$$Z + E_T \rightarrow \frac{\sum \tilde{Z}_{ci}}{n}. \quad (3)$$

另外, 易证 \tilde{Z}_{ci} 的方差等于 E_{rci} 的方差。

(2) 下面, 再分析不同计算精度的影响: 以位势高度场 Z 为例进行分析, 当使用同样的初始条件计算, 仅计算精度 p 不同时, 需要对公式 (1) 中的记号改写为含 p 的形式:

$$\begin{cases} \tilde{Z}_{cip1}(t) = Z(t) + E_T(t) + E_{rcip1}(t), \\ \tilde{Z}_{cip2}(t) = Z(t) + E_T(t) + E_{rcip2}(t), \end{cases} \quad (4)$$

其中, \tilde{Z}_{cip1} 和 \tilde{Z}_{cip2} 为实际的计算值, Z 为理论值, $E_T(t)$ 为计算方法产生的离散误差, $E_{rcip1}(t)$ 和 $E_{rcip2}(t)$ 为舍入误差。

公式 (4) 中两式相减, 得

$$\tilde{Z}_{cip1} - \tilde{Z}_{cip2} = E_{rcip1} - E_{rcip2}. \quad (5)$$

一般而言, 在同样的计算系统中, $p_1 < p_2$ 时, p_2 精度越高, E_{rcip2} 越小, 如果 $E_{rcip2} \ll E_{rcip1}$, 可以得到:

$$\tilde{Z}_{cip1} - \tilde{Z}_{cip2} \approx E_{rcip1}. \quad (6)$$

(6) 式表明: 研究不同 CPU 数时的计算结果差异可以反映出此精度条件下的精度误差, 反之也成立。

一般来说, 能够在数值模式中使用的计算精度通常为单精度和双精度两种, 仅用这两种精度的结果很难估计出 E_{rcip1} 的分布。而改变 CPU 计算数目相对容易得多, 因此有可能用不同 CPU 的计算结果来估计出 E_{rcip1} 的分布范围。

(3) 分析不同计算机系统的影响: 在不同的计算系统中, 使用相同的 CPU 数目和相同的计算精度运算, 由于系统中浮点处理的方法不同, 计算结果还是会有差异。此时公式 (1) 中的记号改写为如下形式:

$$\begin{cases} \tilde{Z}_{cipjml}(t) = Z(t) + E_T(t) + E_{rcipjml}(t), \\ \tilde{Z}_{cipjm2}(t) = Z(t) + E_T(t) + E_{rcipjm2}(t), \end{cases} \quad (7)$$

其中, ci 为 CPU 数目, p_j 为计算精度, $m1$ 和 $m2$ 表示两种不同的计算机系统。 \tilde{Z}_{cipjml} 和 \tilde{Z}_{cipjm2} 为实际的计算值, Z 为理论值, $E_T(t)$ 为计算方法产生的离散误差, $E_{rcipjml}(t)$ 和 $E_{rcipjm2}(t)$ 为舍入误差。

从公式 (7) 可见, 其形式与式 (1) 相似, 能够

得出下面的公式:

$$Z + E_T \rightarrow \frac{\sum \tilde{Z}_{cipjmk}}{n}, \quad (8)$$

其中, mk 为第 $1 \sim n$ 种不同的计算机系统。

综合公式 (1) ~ (8) 的结果, 可以看出, 使用不同 CPU 数、不同计算精度、不同计算机系统来研究气候模式的舍入误差在一定程度上是等价的。

在以下的讨论中我们假定计算精度相同, 从公式 (3) 可以发现:

$$Z + E_T \rightarrow \frac{\sum \tilde{Z}_{ci}}{n}.$$

这个公式的另一重含义就是: 多个不同 CPU 的计算结果的平均值可以有效地消除舍入误差的影响。

对 \tilde{Z}_{ci} 的计算方法进行扩展, 我们就可以得到一种专门针对舍入误差的集合预报方法, 称为 RME (Round-off error Mean Ensemble)。

因为已知造成 \tilde{Z}_{ci} 不同的原因是由于并行计算过程中累加顺序有变化, 这是不改变问题的计算本质的一种变化。因此, 可以设法在计算过程中, 构造出其他的持续不改变计算本质的“结合律扰动”, 来产生出一系列无法区分优劣的 \tilde{Z}_i , 当计算个数 (n) 足够大, 由于扰动的随机性, 有

$$Z + E_T \rightarrow \frac{\sum \tilde{Z}_i}{n}.$$

由上面的方法可以看出, RME 方法本质上是一种通过持续的随机微扰来生成多个结果再平均消除舍入误差影响的方法 (也可以将 RME 称作微扰集合法)。RME 的关键是微扰要足够小, 小到和单步浮点计算时的舍入误差同样量级, 这样才能保证每个结果在进行试验的计算环境下不可区分优劣, 才能进行集合。本文中的不同 CPU 计算结果可以看作是 RME 实现中的一个实例。

从 RME 的实现方式可以看出, 这种集合方法与常用的初值集合方法不同, RME 有可以对同样的初值进行集合预报的优点, 关于 RME 的应用方法和效果将在后续研究中给出。

5 结论和讨论

本文的研究表明, 在同样的计算精度下, 仅改变并行计算过程中的归约累加顺序对 SAMIL 模式计算结果造成的影响从全球平均的角度来看较小, 相对计算值的绝对值, 差别在 0.1% 范围内。使用

双精度计算时能够在一定程度上改进模拟结果,因此在计算时间和计算条件允许的情况下,应尽量采用双精度或更高的计算精度来做气候问题的数值模拟。虽然舍入误差的全球平均值不大,但其误差分布的差别范围并不小。从文中的数值试验可见, r_1 、 r_2 的数值较大的区域很大,因此舍入误差的影响,在“年际变化”等问题的研究时必须给予充分的重视。

在使用 SAMIL 数值模式进行计算时,结果本身包含了舍入误差的影响,因此不能说串行的结果比并行计算的结果更加准确。正是由于这个原因,只要保证了计算的等价性,就没有必要一定在并行计算中为了保持并行结果与串行结果相同,而进行特殊的处理。可以说并行计算结果与串行结果完全一致并没有改进结果,而是把舍入误差影响隐藏起来了。对于 CAM 等保持并行结果和串行结果一致的模式,不能通过调整 CPU 个数来分析总体舍入误差的范围,只能通过对比不同计算机系统之间或不同编译器之间的结果才可能估算其舍入误差影响程度(即本文第 3 种方法),或采用人为的办法来改变计算顺序,取得不同的计算结果研究舍入误差影响程度。

在对复杂数值模式的舍入误差分析的基础上,本文指出了进行 RME 集合预报的可能性,这种试验方法的操作技巧和应用效果将是未来研究的一个方向。计算步长(积分步长、空间格距等)对总体计算误差的影响也是值得进一步研究的工作。

本文叙述的数值试验可以对大部分的气候数值模式进行,如果某种模式的结果受舍入误差的影响较大,至少可以说明不适合用这种模式的一个试验结果来进行实际的气候模拟研究,需要用其他的办法(如集合预报)来减少这种影响。

舍入误差除了会引起计算结果对计算顺序的依赖,还可能造成计算的不稳定,为此数值模式计算过程中应遵循数值计算方法的要求,在选用和设计算法时应遵循通常的减小舍入误差原则:选用数值稳定的计算公式,控制舍入误差的传播、尽量简化计算步骤以便减少运算次数、合理安排运算顺序等。

致谢 文中所用模式的计算主要是在中国科学院大气物理研究所的 IBM-P690 和联想 1800 计算机完成,在此表示感谢。另外,感谢两名审稿人所提的宝贵建议,这些建议对改进文章的质量起了很大

的作用。

参考文献 (References)

- [1] Miyakoda K, Hembree G D, Strickler R F, et al. Cumulative results of extended forecast experiments I. Model performance for winter cases. *Mon. Wea. Rev.*, 1972, **100** (12): 836~855
- [2] Shukla J. *Predictability, Large-Scale Dynamical Processes in the Atmosphere*. Academic Press, 1985. 87~122
- [3] Kalnay E, Dallavalle P J, Epstein E S. *Hedging Perfect Prog Forecasts Towards Climatology*. Camp Spring, 1987. 197~201
- [4] Dalcher A, Kalnay E. Error growth and predictability operational ECMWF forecasts. *Tellus*, 1987, **39A**: 474~491
- [5] Reynolds C A, Webster P J. Random error growth in NMC's global forecasts. *Mon. Wea. Rev.*, 1994, **122** (6): 1281~1305
- [6] 李建平, 曾庆存, 丑纪范. 非线性常微分方程的计算不确定原理 I. 数值结果. 中国科学 (E 辑), 2000, **30** (5): 403~412
Li Jianping, Zeng Qingcun, Chou Jifan. Computational uncertainty principle in nonlinear ordinary differential equations -I. Numerical results. *Science in China (Series E)*, 2000, **43** (5): 449~461
- [7] 李建平, 曾庆存, 丑纪范. 非线性常微分方程的计算不确定原理 II. 理论分析. 中国科学 (E 辑), 2000, **30** (6): 550~567
Li Jianping, Zeng Qingcun, Chou Jifan. Computational uncertainty principle in nonlinear ordinary differential equations -II Theoretical analysis. *Science in China (Series E)*, 2001, **44** (1): 55~74
- [8] Wang Pengfei, Huang Gang, Wang Zaizhi. Analysis and application of multiple precision computation and round-off error for nonlinear dynamical systems. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2006, **23** (5): 758~766
- [9] Walter J K. Note on the accumulated error in the numerical integration of a simple forecast model. *Mon. Wea. Rev.*, 1969, **97** (12): 896~901.
- [10] Williamson D L, Washington W M. On the importance of precision for short-range forecasting and climate simulation. *J. Appl. Meteor.*, 1973, **12** (8): 1254~1258
- [11] Rosinski J M, Williamson D L. The accumulation of rounding errors and port validation for global atmospheric models. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 1997, **18** (2): 552~564
- [12] Janakiraman S R, Ratnam J V, Akshara K. Study of machine round-off response on weather forecasting simulations using high performance computing systems. The Fourth International Conference on High-Performance Computing in

the Asia-Pacific, Region-Volume 2, 2000, 1070~1072

- [13] 王在志, 吴国雄, 刘平, 等. 全球海-陆-气耦合模式大气模式分量的发展及其气候模拟性能 I: 水平分辨率的影响. 热带气象学报, 2005, **21**: 225~237

Wang Zaizhi, Wu Guoxiong, Liu Ping, et al. The development of GOALS/LASG AGCM and its global climatological features in climate simulation. I: Influence of horizontal resolution. *Journal of Tropical Meteorology* (in Chinese), 2005, **21**: 225~237

- [14] 王在志, 宇如聪, 王鹏飞, 等. 全球海-陆-气耦合模式大气模式分量的发展及其气候模拟性能 II: 垂直分辨率的提高及其影响. 热带气象学报, 2005, **21**: 238~247

Wang Zaizhi, Yu Rucong, Wang Pengfei, et al. The development of GOALS/LASG AGCM and its global climatological features in climate simulation. II: The increase of vertical resolution and its influences. *Journal of Tropical Meteorolo-*

gy (in Chinese), 2005, **21**: 238~247

- [15] 周天军, 宇如聪, 王在志, 等. 大气环流模式 SAMIL 及其耦合模式 FGOALS-s. 北京: 气象出版社, 2005. 288pp

Zhou Tianjun, Yu Rucong, Wang Zaizhi, et al. *Atmosphere Circulation Model SAMIL and the Full Coupled Model FGOALS-s* (in Chinese). Beijing: China Meteorological Press, 2005. 288pp

- [16] Wang Z Z, Wu G X, Wu T W, et al. Simulation of Asian monsoon seasonal variations with climate model R42L9/LASG. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2004, **21**: 879~889

- [17] 王鹏飞, 王在志. 大气环流数值模式的一种并行化方案. 大气科学, 2006, **30** (3): 519~525

Wang Pengfei, Wang Zaizhi. A parallelization scheme for atmospheric general circulation model. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2006, **30** (3): 519~525