Практическое занятие 2. Исследование схем переноса.

Секция "Науки о Земле", проект "Моделирование динамики морского льда".

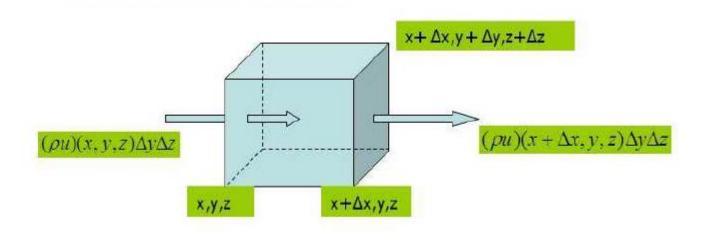
Яковлев Николай Геннадьевич Петров Сергей Сергеевич

Полная система уравнений динамики морского льда

$$\begin{cases} m(\partial_t + f\mathbf{k} \times)\mathbf{u} = a\tau - C_d a \rho_0(\mathbf{u} - \mathbf{u_0})|\mathbf{u} - \mathbf{u_0}| + \mathbf{F} - mg\nabla H \\ \tau = C_a \rho_a |\mathbf{u_a}|\mathbf{u_a} \\ F_I = \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_k}, \ I = 1, 2 \\ \sigma_{kl}(\mathbf{u}) = \frac{P}{2(\Delta + \Delta_{min})} \Big[(\dot{\varepsilon}_d - \Delta)\delta_{kl} + \frac{1}{e^2}(2\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_d \delta_{kl}) \Big] \\ \dot{\varepsilon}_{kl} = \frac{1}{2}(\partial_k u_l + \partial_l u_k); \quad \dot{\varepsilon}_d = \dot{\varepsilon}_{kk} = \dot{\varepsilon}_{11} + \dot{\varepsilon}_{22} \\ \dot{\varepsilon}_s = (\dot{(\varepsilon}_{11} - \dot{\varepsilon}_{22})^2 + 4\dot{\varepsilon}_{12}^2)^{1/2}; \quad \Delta = (\dot{\varepsilon}_d^2 + \frac{1}{e^2}\dot{\varepsilon}_s^2)^{1/2} \\ \frac{\partial_t A + \nabla \cdot (\mathbf{u}A) = 0, \ A \leq 1}{\partial_t m + \nabla \cdot (\mathbf{u}m) = 0} \end{cases}$$

Откуда берется уравнение переноса массы?

Continuity of mass: Consider a fixed infinitesimal volume of fluid (Eulerian view) and flow of mass through its surfaces.



- Change in mass in x-direction: $(\rho u)(x,y,z)\Delta y\Delta z (\rho u)(x+\Delta x,y,z)\Delta y\Delta z = -\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\Delta x\Delta y\Delta z$
- Total change in mass (continuity of mass):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial (\rho u)}{\partial x} - \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} - \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \qquad or \qquad \frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \, ; \qquad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \quad \longleftarrow \quad material \ derivative$$

Уравнение перноса скаляров

Let us consider the scalar transport equation on sphere. Hereinafter, the transported scalar *m* will be called the mass

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \nabla \cdot (m\mathbf{u}) = 0. \tag{1.1}$$

Here **u** is the known velocity field that depends on time and assumed to be specified on the whole sphere and smooth enough.

In this section, we will consider various explicit time discretizations of equation (1.1) based on the Taylor expansion. The choice of explicit time discretizations in the finite element ice models is due to the low complexity of the mass matrix inversion and the possibility of using the classical version of the flux correction method [9] to obtain a positive globally conservative solution, which will be discussed below.

Временная схема TG2

By expanding the mass function in a Taylor series and using equality (1.1) under the assumption of a constant velocity field \mathbf{u} within the time integration step [16], the second order time approximation Taylor–Galerkin

(TG2) method is obtained:

$$m^{n+1} = m^n - \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \cdot (\mathbf{u} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u})). \tag{1.2}$$

The last term in (1.2) can be interpreted as diffusion.

Временная схема TTG2

We also consider a two-step variation of the standard Taylor–Galerkin method (1.2), which is written as [16]:

$$m^{n+1/2} = m^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u})$$

$$m^{n+1} = m^n - \Delta t \nabla \cdot (m^{n+1/2} \mathbf{u}).$$
(1.3)

Both equalities have the same structure up to numerical factors. Therefore, the computational costs for assembling the right-hand sides in the two-step variation (1.3) are less than in the one-step analogue (1.2), since there is no need to discretize the diffusion term with second derivatives. However, this method requires a two-fold solution of the arising systems of linear equations with a mass matrix. Despite the fact that all the arising systems of linear equations are solved with high precision (by the bi-conjugate gradients method with an ILU2 preconditioner with an accuracy of 10^{-9} in the relative residual norm), the computations showed that the assembly time for the right-hand sides of discrete equations significantly exceeds the time for solving the linear systems.

Задача 1: Убедитесь, что после подстановки, схема TTG2 эквивалентна схеме TG2.

Временная схема TTG3

Let us consider a two-step method of the form

$$m^{n+1/2} = m^n - \frac{1}{3} \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \alpha \Delta t^2 \nabla \cdot \left[\mathbf{u} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) \right]$$

$$m^{n+1} = m^n - \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \cdot \left[\mathbf{u} \nabla \cdot (m^{n+1/2} \mathbf{u}) \right].$$
(1.4)

Substituting the first equality (1.4) into the second one can make sure that this two-step method is an approximation of equation (1.1) with the third order in time for any value of the parameter α . In [14], it is shown that the choice of $\alpha = 1/9$ makes the phase velocity of the two-step scheme identical to the one-step and minimizes the amplitude error.

Задача 2: Убедитесь, что после подстановки, схема TTG3 эквивалентна схеме TG3.

Временная схема TTG4

Consider now a two-step method of the form

$$m^{n+1/2} = m^n + \alpha \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \beta \Delta t^2 \nabla \cdot \left[\mathbf{u} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) \right]$$

$$m^{n+1} = m^n + \Delta t \nabla \cdot (m^{n+1/2} \mathbf{u}) + \gamma \Delta t^2 \nabla \cdot \left[\mathbf{u} \nabla \cdot (m^{n+1/2} \mathbf{u}) \right].$$
(1.5)

It was shown in [14] that the choice

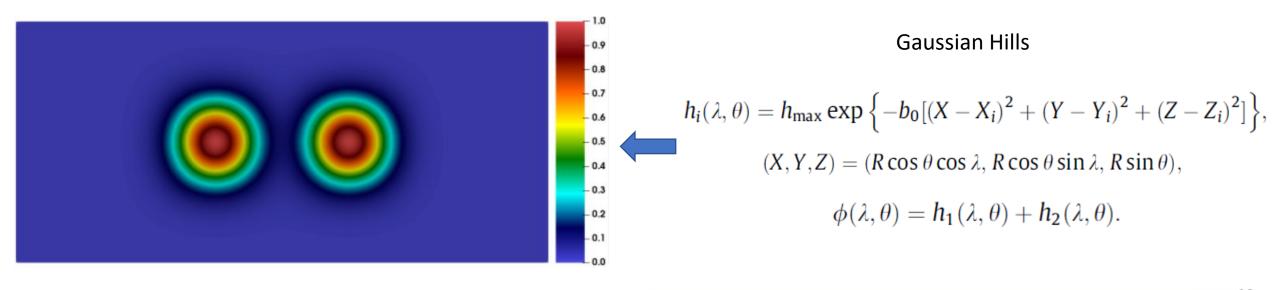
$$\alpha = 0.1409714$$
, $\beta = 0.1160538$, $\gamma = 0.3590284$

gives an approximation of equation (1.1) of the fourth order of accuracy in time.

The computational complexity of one iteration of the two-step method of the third (1.4) and fourth (1.5) orders is greater than the one-step method (1.2) due to the need to solve a linear systems with a mass matrix twice.

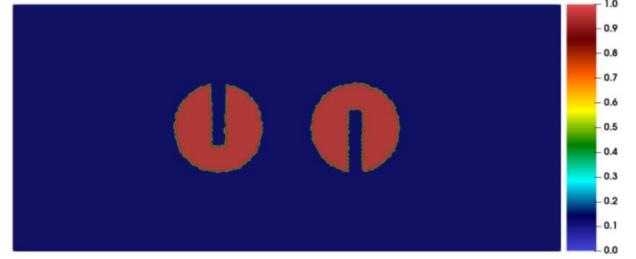
Задача 3*: Убедитесь, что после подстановки, схема TTG4 эквивалентна схеме TG4. Получите уравнение на коэффициенты и решите его численно, проверив данные значения.

Тестовые начальные распределения массы ¹⁴



Slotted Cylinders

$$\phi(\lambda, \theta) = \begin{cases} c & \text{if } r_i \leqslant r \text{ and } |\lambda - \lambda_i| \geqslant r/6 \text{ for } i = 1, 2, \\ c & \text{if } r_1 \leqslant r \text{ and } |\lambda - \lambda_1| < r/6 \text{ and } \theta - \theta_1 < -\frac{5}{12}r, \\ c & \text{if } r_2 \leqslant r \text{ and } |\lambda - \lambda_2| < r/6 \text{ and } \theta - \theta_2 > \frac{5}{12}r, \\ b & \text{otherwise} \end{cases}$$



Тестовые поля скорости¹⁴

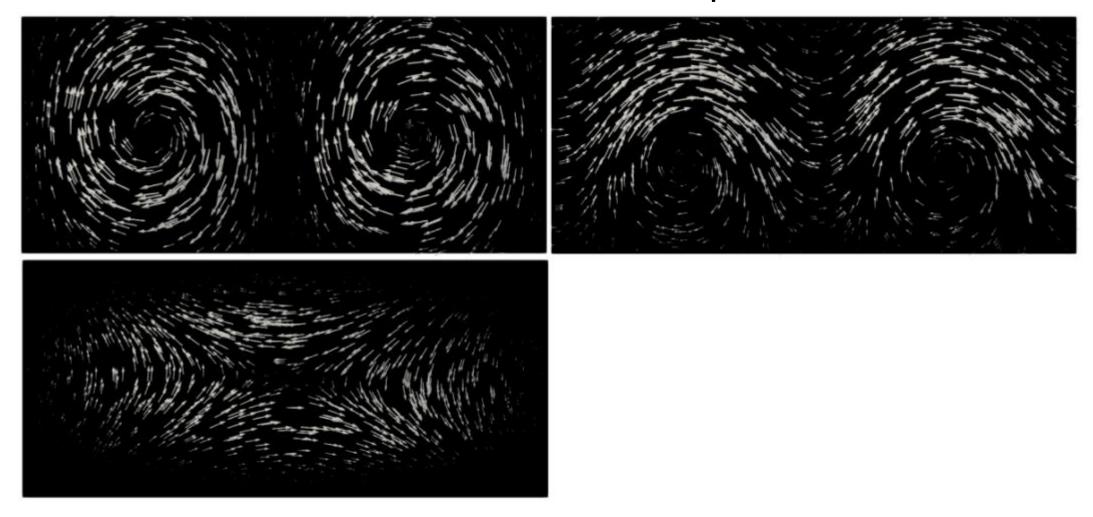


Fig. 2: Test velocity fields. A pair of vortices (ND1) (top left), two-vortex flow with displacement (ND2) (top right), divergent field (D) (bottom).

Как конфигурировать модель?

config.json

```
Полный путь до файла, содержащего сетку
"Mesh": "/data90t/geosci/spetrov/TRANSPORT TESTS/CONVERGENCE/mesh200.pmf
"Total time (h)": 300.0,
                                                                                        Время счета в часах
 "Initial Mass": {
                                                                                        Тип НУ (slotted cylinders, Gaussian hills)
     "type": "slotted cylinders",
     "amplitude": 1.0,
     "scale factor": 1.0,
     "radius": 0.5,
     "background": 0.0,
                                                                                      Параметры НУ (уточнить у меня, какие лучше брать)
     "width": 5.0,
     "first center coords": [2.3561944901, 0.0],
     "second center coords": [3.9269908169, 0.0]
"Velocity Field": {
                                                                                        Тип скоростей (non-div1, non-div2, non-div3, div)
  "type": "non-div2",
 "Courant number": 0.1,
                                                                                        Число Куранта
 "scale factor (m/s)": 40.0
                                                                                        Амплитуда скорости (уточнить у меня)
"Advection Solver": {
  "type": "TG2",
                                                                                        Тип схемы переноса (TG2, TTG2, TTG3, TTG4)
 "FCT": true,
  "cd": 0.5
                                                                                        Делается ли коррекция потоков (true, false)
                                                                                        Параметр Лернера (в вычислениях используем 0.5)
"Output Parameters": {
  "verbose": true,
                                                                                        Писать что-то в файл? (почти всегда true)
 "print errors": true,
 "number of screenshots": 2,
                                                                                        Писать ли ошибки в файл? (почти всегда true)
  "output directory": "./screenshots/",
                                                                                        Количество выводов (делается равномерно
  "keymoments directory": "./keymoments/",
  "mass file": "./MassInt.txt"
                                                                                         по времени)
                                                                                        Спецификация директорий вывода
```

Как запускать модель?

На кластере ИВМ РАН используется система очередей slurm.

launcher.qs

Чтобы запустить MPI задачу, необходимо собрать код, настроить конфигурационный файл (config.json), файл запуска (launcher.qs) и запустить задачу в очередь sbatch launcher.qs.
Посмотреть статус задачи можно написав команду slurmtop. Чтобы отменить выполнение задачи можно прописать scancel + номер задачи, который выдается при запуске

Практическое задание

Вам дан параллельный код, реализующий все описанные выше временные схемы. Необходимо провести следующие эксперименты:

- Продемонстрировать сходимость метода по норме интегральной ошибки при измельчении шага сетки. В качестве тестовых полей берутся Gaussian Hills + ND1, T = 300 hours, C = 0.4, рассмотрите схемы TG2+FCT и TTG4+FCT;
- 2) Построить график зависимости интегральной ошибки от числа Куранта в диапазоне 0.1-1.0 (с шагом 0.1) для конфигурации **Slotted Cylinders + ND2, T = 300 hours**, рассмотрите все доступные схемы с коррекцией потоков;
- 3) Продемонстрировать глобальную консервативность метода **TTG4+FCT** и его положительность, в конфигурации **Slotted Cylinders + D, T = 240 hours, C = 0.4, h = 200km**. Продемонстрировать отсутствие положительности у схемы **TG2**;
- 4) Построить анимацию эксперимента из пункта 1,2,3.