Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Численное моделирование мезомасштабного переноса примеси над гидрологически неоднородной поверхностью

Дипломная работа студента кафедры вычислительных технологий и моделирования Микушина Дмитрия Николаевича

Научный руководитель чл.-корр. РАН В. Н. Лыкосов

Москва

2008

Содержание

Введение	3
1 Методы численного моделирования переноса пассивной примеси	6
1.1 Схема МРДАТА	6
1.1.1 Одномерный случай	6
1.1.2 Общий случай	9
1.1.3 Корректность и устойчивость алгоритма	11
1.2 Схема "чехарда"	14
1.3 Двумерный тест	15
1.3.1 Решение по схеме <i>MPDATA</i>	16
1.3.2 Решение по схеме "чехарда"	25
1.4 Трехмерный тест	27
1.4.1 Решение по схеме <i>MPDATA</i>	28
1.4.2 Решение по схеме "чехарда"	30
2 Мезомасштабное моделирование переноса примеси	32
2.1 Применение схем MPDATA и "чехарда" для решения уравнения переноса пассивн	ой
примеси в мезомасштабной модели	35
2.2 Сравнительный анализ результатов тестовых расчётов с использованием схо	ew.
"чехарда" и <i>MPDATA</i>	40
2.3 Моделирование переноса примеси над Западной Сибирью	41
3 Программная реализация	44
3.1 Инструментарий	44
3.2 Структура библиотеки	45
4 Заключение	47
Литература	48

Введение

Климатические изменения и хозяйственная деятельность человека приводят к осушению и опустыниванию огромных территорий. Повышение средней температуры воздуха, вырубка лесов, экстенсивное развитие сельского хозяйства, строительство ирригационных и гидрологических объектов – всё это сказывается на полноводности рек, приводит к обмелению озёр и эрозии почвы.

Из-за забора воды для орошения из основных питающих рек ускоряющимися темпами мелеет бессточное солёное озеро — Аральское море в Средней Азии, на границе Казахстана и Узбекистана — в него более чем в 6 раз сократился объём речного стока. На 2003 год площадь поверхности Аральского моря составляла около четверти первоначальной, а объём воды — около 10% (рис. 1). Образовавшаяся в результате этого кристаллизованная соль является в настоящее время причиной возникновения соляных бурь, приводящих к загрязнению и эрозии почвы на сельскохозяйственных территориях.





Рис. 1. Спутниковые снимки Аральского моря

Рис. 2. Весенняя пыльная буря в Южной Корее

Возрастает интенсивность весенних пыльных бурь (HwangSa) в Японии и Южной Корее (рис. 2). Мелкозернистые фракции песка и пыль выносятся сильными муссонными ветрами из крупнейшей в Азии пустыни Гоби, занимающей обширные территории в северном Китае и Монголии. На прилегающих территориях почвы всё более опесчаниваются. Из-за глобального потепления и сельскохозяйственной деятельности пустыня наступает со скоростью около 3 км в год. Похожие процессы протекают в системе пустынь северной Африки. Частицы песка и пыль увлекаются атлантическим переносом и достигают побережья Америки.

Крупные заводы и иные загрязняющие производства способны оказывать губительное воздействие на экологию густонаселённых районов вследствие своего расположения и особенностей локальных

атмосферных процессов. В частности, на перенос вредных примесей (аэрозолей) техногенного происхождения большое влияние могут оказать бризовые циркуляции, возникающие над гидрологически неоднородной территорией [1-3]. Результаты мезомасштабного численного моделирования показали [4], что наблюдаемые превышения предельно допустимых концентраций некоторых загрязняющих веществ в воздухе крупных городов могут быть в значительной мере обусловлены переносом примеси к источнику возвратным течением бризовой циркуляции. Моделирование этих процессов может быть использовано при планировании оптимального размещения индустриальных парков и минимизации вредного воздействия существующих производств.

Динамика рассмотренных выше явлений мало изучена, остаются неясными условия внезапного возникновения пыльных бурь и смерчей. Численное моделирование позволило бы оценить их влияние на климат и исследовать взаимосвязь с другими атмосферными процессами. Целью настоящей работы является моделирование процессов мезомасштабного (порядка 10^2 км по горизонтали) переноса примесей в атмосфере, имеющее важное методологическое значение как для анализа изменений экологической обстановки под воздействием промышленных выбросов, так и для исследования динамики пыльных бурь. Эту задачу целесообразно решать, развивая уже созданную и действующую атмосферную модель, в которую было бы удобно включать дополнительные блоки. Одной из таких моделей, достаточно полно представляющих трехмерную мезомасштабную динамику атмосферы, является негидростатическая модель NH3D [5], разработанная в Университете г. Рединга. Для корректного расчёта турбулентных потоков над гидрологически неоднородной территорией в модель NH3D добавлен радиационный блок и блок одномерной параметризации термодинамики водоёмов [1,2].

Ранее в работах [3,6] для параметризации переноса примеси в мезомасштабной модели была использована разностная схема "чехарда", описанная, например, в [7] и получившая широкое применение в подобного рода задачах. Однако результаты численных экспериментов свидетельствуют о весьма ограниченной применимости данной схемы ввиду ряда существенных недостатков. Так, рост амплитуды вычислительной моды со временем может приводить к "расщеплению" на два решения по чётным и нечётным временным слоям. Кроме того, схема не является монотонной, и попытки корректировать получаемые отрицательные значения нарушают её консервативность. Альтернативой данному подходу является использование разностной схемы *МРDATA* [8,9] из семейства схем Лакса-Вендрофа. Эта схема в последнее время часто применяется для численного решения уравнений переноса, например, водяного пара, и реализована, в частности,

в мезомасштабной региональной модели <u>WRF</u> [10]. Схема имеет высокий порядок аппроксимации, небольшую вычислительную сложность и при этом является положительно определённой.

Первый раздел дипломной работы посвящен теоретическому описанию и сравнительному анализу двух наиболее популярных схем расчёта переноса примеси: схемы "чехарда" и схемы *МРDATA* в одномерном и многомерном случаях. Рассматриваются корректность и устойчивость алгоритмов по совокупности итераций, приведены результаты серий численных экспериментов в двумерной и трёхмерной постановках в сравнении с известными аналитическими решениями. Во второй части работы перенос примеси рассматривается в совокупности с другими атмосферными процессами, описываемыми мезомасштабной моделью. Эксперименты со схемами *МРDATA* и "чехарда" проведены для задач о переносе пассивной примеси над гидрологически неоднородной подстилающей поверхностью — модельным озером эллиптической формы и реальной территорией в Западной Сибири. В третьем разделе представлена структура и некоторые особенности реализации разработанного программного пакета.

1 Методы численного моделирования переноса пассивной примеси

Пусть $\psi(\bar{x},t)$ — концентрация аэрозольной субстанции (примеси), мигрирующей вместе с потоком воздуха в атмосфере, $\bar{v}(\bar{x},t)$ — вектор скорости частиц воздуха, $R=R(\bar{x},t)$ —источник субстанции ψ , t — время, \bar{x} — вектор пространственных координат. Тогда перенос примеси вдоль траектории частиц воздуха, сохраняющий массу примеси, записывается с помощью следующего уравнения:

$$\frac{\partial G\psi}{\partial t} + \overline{\nabla} \cdot (\bar{v}\,\psi) = GR,\tag{1.1}$$

где $G = G(\bar{x})$ — некоторая известная функция, например, якобиан преобразования пространственных координат. В данном разделе будут рассмотрены две различные схемы для численного решения уравнения (1.1): схема *MPDATA* и схема "чехарда".

1.1 Cxema MPDATA

Для численного решения уравнений гидродинамики в работах [8,9,11] предложен и получил развитие класс вычислительно эффективных конечно-разностных алгоритмов *MPDATA* (*Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm*). Схема *MPDATA* имеет второй порядок точности и является положительно определенной, а сам метод содержит внутришаговый итерационный процесс. В последнее десятилетие *MPDATA* превратился из простой схемы адвекции в универсальный подход к решению обобщенных уравнений переноса.

Если итерационный процесс состоит из одного шага, то *MPDATA* вырождается в обыкновенную схему донорских ячеек (схему против потока), которая является положительно определённой, но при этом имеет лишь первый порядок точности. В случае невырожденного итерационного процесса точность вычислений очередной итерации возрастает за счет оценки и компенсации остаточной ошибки предыдущей итерации.

1.1.1 Одномерный случай

Как будет показано ниже, полученные в данном разделе результаты можно будет обобщить и для многомерного случая. Для простоты сначала рассмотрим модель одномерного уравнения:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\psi) = 0, \qquad u \neq Const. \tag{1.2}$$

За основу при численном решении уравнения (1.2) принимается следующая разностная схема:

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^n - \left[F\left(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+1/2}^{n+1/2}\right) - F\left(\psi_{i-1}^n, \psi_i^n, u_{i-1/2}^{n+1/2}\right) \right], \tag{1.3}$$

где

$$F(\psi_i, \psi_{i+1}, u) = \left[(u + |u|)\psi_i + (u - |u|)\psi_{i+1} \right] \cdot \frac{\Delta t}{2\Delta x}$$
 или
$$F(\psi_i, \psi_{i+1}, u) = \frac{1}{2}(U + |U|)\psi_i + \frac{1}{2}(U - |U|)\psi_{i+1},$$
 (1.4)

 $U = \frac{u \Delta t}{\Delta x}$ — число Куранта. Индекс "n" у скорости u будет опущен здесь и далее, если это не приводит к неправильному пониманию.

Условие устойчивости для донорской схемы (1.3) имеет вид [13]:

$$\max_{i,n} \left| u_{i\pm 1/2} \right| \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1. \tag{1.5}$$

Будем называть схему вида $\psi_i^{n+1} = \sum_l c_{l-i} \psi_l^n$ положительно определённой, если $(\psi_i^0 \ge 0 \ \forall i) \Rightarrow (\psi_i^n \ge 0 \ \forall i, \forall n)$ [11], и монотонной, если она переводит все монотонные функции в монотонные с тем же направлением роста [12].

Утверждение. Если выполнено условие устойчивости (1.5), то схема (1.3)-(1.4) является монотонной и положительно определенной.

Доказательство. Для монотонности схемы необходимо и достаточно, чтобы все коэффициенты при ψ в правой части (1.3) были неотрицательны [12]. Выпишем (1.3) подробно:

$$\psi_{i}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(u_{i-1/2} + \left| u_{i-1/2} \right| \right) \psi_{i-1}^{n}$$

$$+ \left(1 - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \left(\left| u_{i+1/2} \right| + u_{i+1/2} - u_{i-1/2} + \left| u_{i-1/2} \right| \right) \right) \psi_{i}^{n}$$

$$- \frac{1}{2} \left(u_{i+1/2} - \left| u_{i+1/2} \right| \right) \psi_{i+1}^{n}$$

$$(1.6)$$

Легко видеть, что при выполнении условия (1.5) $(\psi_i^n \ge 0 \ \forall i) \Rightarrow (\psi_i^{n+1} \ge 0 \ \forall i)$, следовательно, положительная определенность схемы (1.3) выполняется. При том же условии все коэффициенты в правой части (1.6) неотрицательны, а значит, схема (1.3) монотонна.

Однако схема (1.3)-(1.4) обеспечивает только первый порядок аппроксимации по пространству и времени и к тому же имеет скрытую численную диффузию. Эту диффузию легко обнаружить в случае однородного потока (u=const). Раскладывая ψ_i^{n+1} , ψ_{i+1}^n , ψ_{i-1}^n вблизи точки (x_i,t^n) по формуле Тейлора до второго порядка и подставляя в (1.3), получим:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_i^n = -\frac{\partial}{\partial x}(u\psi_i^n) + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{2}(|u|\Delta x - u^2\Delta t)\frac{\partial\psi_i^n}{\partial x}\right]. \tag{1.7}$$

Из (1.7) видно, что схема (1.3) со вторым порядком аппроксимирует уравнение

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial x} \right), \tag{1.8}$$

где $K=\frac{1}{2}(|u|\Delta x-u^2\Delta t)=\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}(|U|-U^2)$. Для того, чтобы улучшить точность аппроксимации уравнения (1.2) схемой (1.3) — (1.4), необходимо построить численную оценку ошибки, представленной в правой части (1.7), и вычесть ее из (1.3). Подобную процедуру использует, к примеру, одношаговая схема Лакса-Вендроффа, в которой правая часть (1.8) аппроксимируется центральными разностями. Основная идея метода MPDATA состоит в применении опять же донорской схемы (1.3) для аппроксимации ошибки $\frac{\partial}{\partial x}\Big(K\frac{\partial \psi}{\partial x}\Big)=\frac{\partial}{\partial x}\Big(v^{(1)}\psi\Big)$, где $v^{(1)}\equiv\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}(|U|-U^2)\frac{1}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial x}$ — т. н. *псевдоскорость*. Верхний индекс ⁽¹⁾ означает, что это первая аппроксимация для компенсации ошибки.

Итак, пусть имеется решение (1.3) на n-ом шаге по времени ψ^n . Для того чтобы компенсировать ошибку между решением $\psi^{(1)}$ по донорской схеме (1.3) — (1.4) и найти решение второго порядка точности ψ^{n+1} на n+1-ом шаге по времени, сначала вычислим псевдоскорости (для удобства безразмерные)

$$V_{i+1/2}^{(1)} \equiv \left(\left| U_{i+1/2} \right| - U_{i+1/2}^2 \right) \frac{\psi_{i+1}^{(1)} - \psi_i^{(1)}}{\psi_{i+1}^{(1)} + \psi_i^{(1)}}$$

$$\text{If } V_{i-1/2}^{(1)} \equiv \left(\left| U_{i-1/2} \right| - U_{i-1/2}^2 \right) \frac{\psi_i^{(1)} - \psi_{i-1}^{(1)}}{\psi_i^{(1)} + \psi_{i-1}^{(1)}},$$

$$(1.9)$$

где $V^{(1)}=v^{(1)}\frac{\Delta t}{\Delta x}$. Далее с помощью донорской схемы найдем аппроксимацию ошибки и вычтем ее из решения $\psi^{(1)}$ первого порядка точности:

$$\psi_i^{(2)} = \psi_i^{(1)} - \left[F\left(\psi_i^{(1)}, \psi_{i+1}^{(1)}, V_{i+1/2}^{(1)}\right) - F\left(\psi_{i-1}^{(1)}, \psi_i^{(1)}, V_{i-1/2}^{(1)}\right) \right], \tag{1.10}$$

Заметим, что условие устойчивости (1.5), т. е. $|U| \le 1$, влечет $-1 \le |U| - U^2 \le 1$, а предполагаемая неотрицательность ψ_i^0 вместе с положительной определенностью донорской схемы (1.3) обеспечивает условие устойчивости для (1.10): $\left|V^{(1)}\right| \le 1$. Таким образом, условие (1.5) является условием устойчивости одновременно и для (1.3), и для (1.10).

Схема из двух итераций — это элементарный алгоритм *MPDATA*. Уравнение (1.10) может быть снова разложено в ряд Тейлора, а остаточная ошибка оценена как в (1.9) и компенсирована как в (1.10). Весь этот процесс оценки и компенсации остаточной ошибки может быть продолжен, итерация за итерацией, вплоть до желаемого уменьшения величины ошибки.

1.1.2 Общий случай

Пусть в (1.1) $G\equiv 1,\; \bar x\;$ — вектор пространственных координат, $\bar v=rac{\partial \bar x}{\partial t}\;$ — вектор скорости потока, а R — функция источника или стока, и рассматривается уравнение переноса

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \overline{\nabla} \cdot (\bar{v} \, \psi) = R. \tag{1.11}$$

Предлагается временная дискретизация (1.11) в виде

$$\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} + \overline{\nabla} \cdot \left(\overline{v}^{n+1/2} \psi^n \right) = R^{n+1/2}. \tag{1.12}$$

Разлагая в (1.12) $\,\psi^{n+1}\,$ и $\,ar v^{n+1/2}\,$ в ряд Тейлора вблизи точки $t=n\Delta t$, получаем

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \overline{\nabla} \cdot \left[\left(\overline{v} + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial \overline{v}}{\partial t} \right) \psi \right] = R + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial R}{\partial t} + O(\Delta t^2). \tag{1.13}$$

Чтобы перевести затем производные по времени в пространственные производные, продифференцируем (1.13) по t:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \overline{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \overline{v}}{\partial t} \psi + \overline{v} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \frac{\partial R}{\partial t} + O(\Delta t). \tag{1.14}$$

Подставляя выражение для $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$ из (1.14) в (1.13), получаем

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\overline{\nabla} \cdot (\bar{v}\,\psi) + R + O(\Delta t),\tag{1.15}$$

Следовательно, (1.12) аппроксимирует (1.11) с первым порядком по t. Используя формулу $\overline{\nabla} \cdot (\bar{v} \; \psi) = \bar{v} \cdot \nabla \psi + \psi (\overline{\nabla} \cdot \bar{v})$, можно переписать (1.14) в виде

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \overline{\nabla} \cdot \left(-\frac{\partial \overline{v}}{\partial t} \psi + \overline{v} (\overline{v} \cdot \nabla \psi) + \overline{v} \psi (\overline{\nabla} \cdot \overline{v}) - \overline{v} R \right) + \frac{\partial R}{\partial t} + O(\Delta t). \tag{1.16}$$

Подставляя (1.16) в (1.13) и группируя члены, окончательно получаем формулу (1.17):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{v} \, \psi) = R - \bar{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{2} \Delta t \bar{v} (\bar{v} \cdot \nabla \psi) + \frac{1}{2} \Delta t \bar{v} \, \psi (\bar{\nabla} \cdot \bar{v}) \right] + \bar{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta t \bar{v} R \right) + O(\Delta t^2), \tag{1.17}$$

в которой ошибка $O(\Delta t)$ из (1.15), обусловленная нецентральной разностью в (1.12), выражена теперь через пространственные производные. Следовательно, схема точности $O(\Delta t^2)$ для (1.11) может быть получена вычитанием аппроксимации этой ошибки из правой части (1.12).

При R=0 весь алгоритм *MPDATA* имеет форму основной схемы (1.18), и каждая итерация в нем есть стандартная схема донорских ячеек с различными аргументами. Первая итерация использует скорость потока $\bar{v}^{n+1/2}$ и ψ^n , в то время как каждая последующая итерация — псевдоскорость V и решение ψ , вычисленные на предыдущей итерации:

$$\psi_{i}^{(l)} = \psi_{i}^{(l-1)} - \sum_{I=1}^{M} \left[F\left(\psi_{i}^{(l-1)}, \psi_{i+e_{I}}^{(l-1)}, V_{i+1/2e_{I}}^{I(l)}\right) - F\left(\psi_{i-e_{I}}^{(l-1)}, \psi_{i}^{(l-1)}, V_{i-1/2e_{I}}^{I(l)}\right) \right], \tag{1.18}$$

где

$$F(\psi_L, \psi_R, V) = \frac{1}{2}(V + |V|) \psi_L + \frac{1}{2}(V - |V|) \psi_R, \tag{1.19}$$

 $i=(i^1,...,i^M),\,e_I$ — единичный вектор в I-ом направлении, V^I — нормализованная псевдоскорость в I-ом направлении, полуцелый и целый индексы соответствуют центру и краю ячейки. Номера итераций l=1,...,L таковы, что $\psi^{(0)}\equiv\psi^n,\,\psi^{(L)}\equiv\psi^{n+1}.$ При L=1 метод MPDATA — это классическая схема донорских ячеек, $V_{i+1/2e_I}^{I~(1)}$ и $V_{i-1/2e_I}^{I~(1)}$ — локальные числа Куранта,

$$V_{i\pm 1/2e_I}^{I\ (1)} = [v^I]_{i\pm 1/2e_I}^{n+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x^I}.$$
 (1.20)

Если $\bar{v}(\bar{x},t)$ — соленоидальный поток ($\bar{V}\cdot\bar{v}=0$), то псевдоскорости вычисляются по следующей формуле:

$$V_{i+1/2e_{I}}^{I(l+1)} = \left[\left| V_{i+1/2e_{I}}^{I(l)} \right| - \left(V_{i+1/2e_{I}}^{I(l)} \right)^{2} \right] \cdot \frac{\psi_{i+e_{I}}^{(l)} - \psi_{i}^{(l)}}{\psi_{i+e_{I}}^{(l)} + \psi_{i}^{(l)}} - \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1,J\neq I}^{M} V_{i+1/2e_{I}}^{I(l)} \cdot \frac{V_{j}^{J(l)}}{V_{i+1/2e_{I}}^{(l)}} \cdot \frac{\psi_{i+e_{I}+e_{J}}^{(l)} + \psi_{i+e_{J}}^{(l)} - \psi_{i+e_{I}-e_{J}}^{(l)} - \psi_{i-e_{I}}^{(l)}}{\psi_{i+e_{I}+e_{I}}^{(l)} + \psi_{i+e_{I}}^{(l)} + \psi_{i+e_{I}-e_{I}}^{(l)} + \psi_{i-e_{I}}^{(l)}},$$

$$(1.21)$$

где

$$\overline{V_{i+1/2e_I}^{I\ (l)}} = \frac{1}{4} \left(V_{i+e_I+1/2e_J}^{I\ (l)} + V_{i+1/2e_J}^{I\ (l)} + V_{i+e_I-1/2e_J}^{I\ (l)} + V_{i+1/2e_J}^{I\ (l)} \right). \tag{1.22}$$

Формула (1.21) есть разностное представление при постоянной скорости \bar{v} оператора дивергенции $\overline{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{2} \varDelta t \bar{v} (\bar{v} \cdot \nabla \psi)\right]$ из правой части (1.17), нормализованное на ψ , плюс компонента псевдоскорости (пропорциональная абсолютной величине V), рассчитываемая для уменьшения ошибки, вызванной представлением пространственных производных в (1.18). По построению схема (1.18) — (1.21) имеет второй порядок точности, если $\bar{v}(\bar{x},t)$ — гладкий соленоидальный поток, а локальные числа Куранта должным образом ограничены (см. раздел 1.5 и [9]).

Если $\bar{v}(\bar{x},t)$ — дивергентный поток ($\overline{\nabla}\cdot\bar{v}\neq0$), то член $\overline{\nabla}\cdot\left[\frac{1}{2}\Delta t\bar{v}\;\psi(\overline{\nabla}\cdot\bar{v})\right]$ из правой части (1.17) вносит значительную ошибку. Для вычисления псевдоскоростей тогда нужно записать дополнительные слагаемые в (1.21):

$$V_{i+1/2e_{I}}^{I\ (l+1)} = \dots + \frac{1}{4} V_{i+1/2e_{I}}^{I\ (l)} \left(V_{i+3/2e_{I}}^{I\ (l)} - V_{i-1/2e_{I}}^{I\ (l)} \right)$$

$$- \frac{1}{4} V_{i+1/2e_{I}}^{I\ (l)} \sum_{J=1;J\neq I}^{M} \left(V_{i+e_{I}+1/2e_{J}}^{I\ (l)} + V_{i+1/2e_{J}}^{I\ (l)} - V_{i+e_{I}-1/2e_{J}}^{I\ (l)} - V_{i+1/2e_{J}}^{I\ (l)} \right),$$

$$(1.23)$$

где знаком ... обозначена правая часть (1.21).

1.1.3 Корректность и устойчивость алгоритма

Донорская схема в трехмерном варианте выглядит следующим образом:

$$\psi_{i,j,k}^{n+1} = \psi_{i,j,k}^{n} - \left[F\left(\psi_{i,j,k}^{n}, \psi_{i+1,j,k}^{n}, U_{i+1/2,j,k}\right) - F\left(\psi_{i-1,j,k}^{n}, \psi_{i,j,k}^{n}, U_{i-1/2,j,k}\right) \right]$$

$$- \left[F\left(\psi_{i,j,k}^{n}, \psi_{i,j+1,k}^{n}, V_{i,j+1/2,k}\right) - F\left(\psi_{i,j-1,k}^{n}, \psi_{i,j,k}^{n}, V_{i,j-1/2,k}\right) \right]$$

$$- \left[F\left(\psi_{i,j,k}^{n}, \psi_{i,j,k+1}^{n}, W_{i,j,k+1/2}\right) - F\left(\psi_{i,j,k-1}^{n}, \psi_{i,j,k}^{n}, W_{i,j,k-1/2}\right) \right].$$

$$(1.24)$$

U, V, W — локальные числа Куранта:

$$U_{i\pm 1/2,j,k} = u_{i\pm 1/2,j,k}^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x'}$$

$$V_{i,j\pm 1/2,k} = v_{i,j\pm 1/2,k}^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta y'}$$
(1.25)

$$W_{i,j,k\pm 1/2} = w_{i,j,k\pm 1/2}^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta z'}$$

(u, v, w) — скорость потока.

Рассуждая так же, как и в одномерном случае, можно показать, что при выполнении условия (1.26)

$$\forall n \ \max_{i,j,k} \left| U_{i\pm 1/2,j,k} \right| + \max_{i,j,k} \left| V_{i,j\pm 1/2,k} \right| + \max_{i,j,k} \left| W_{i,j,k\pm 1/2} \right| \le 1 \tag{1.26}$$

схема (1.24) является монотонной и положительно определенной.

Достаточное условие устойчивости донорской схемы (1.18)-(1.19) в общем виде может быть записано следующим образом [13]:

$$\forall n, \forall i = (i_1, \dots, i_M) \colon \sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I \ (1)} \right| \equiv C_i \le \mathfrak{C} \le 1,$$
 (1.27)

Константа $\mathbb{C} \leq 1$ указывает на то, что в случае дивергентного потока $(\overline{\nabla} \cdot \bar{v} \neq 0)$ традиционное ограничение, аналогичное (1.26), может оказаться недостаточным, и как следует из экспериментов и простого анализа поведения схемы возле точки, в которой компонента скорости изменяется от v^I до $-v^I$, это условие должно быть заменено на (1.27) с $\mathbb{C} \leq \frac{1}{2}$ [13].

Алгоритм *MPDATA* построен на основе хорошо известной донорской схемы. Для того чтобы показать корректность всей схемы в целом, нужно продемонстрировать, что при $\Delta t \to 0$, $\Delta x^I \to 0$ корректирующие итерации (l>1 в (1.18)) не будут влиять на решение, полученное по донорской схеме (l=1 в (1.18)). Нетрудно увидеть, что в случае выполнения условия (1.27) при $\Delta t \to 0$, $\Delta x^I \to 0$ из (1.21) имеем $V_{l+1/2e_J}^{I\ (l)} \to 0$ $\forall l>1$. Последнее означает, что при l>1 (1.18) сходится к уравнению $\frac{\partial \psi}{\partial t}=0$, и вся схема корректна.

Как показано в работе [11], из устойчивости схемы с одной итерацией следует устойчивость всех схем с любым числом итераций. Перепишем (1.21) при l=1 в виде:

$$V_{i+1/2e_{I}}^{I(2)} = \left[\left| V_{i+1/2e_{I}}^{I(1)} \right| - \left(V_{i+1/2e_{I}}^{I(1)} \right)^{2} \right] \cdot \xi_{I} - \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1,J\neq I}^{M} V_{i+1/2e_{I}}^{I(1)} \cdot \overline{V_{l+1/2e_{I}}^{J(1)}} \cdot \beta_{IJ}$$
 (1.28)

В силу положительной определенности донорской схемы $\forall I, \forall J \ |\xi_I| \leq 1, \left|\beta_{IJ}\right| \leq 1.$ Из условия (1.27) следует, что $\left|V_{i+1/2e_I}^{I\ (1)}\right| \leq \mathfrak{C} \leq 1$, откуда $0 \leq \left|V_{i+1/2e_I}^{I\ (1)}\right| - \left(V_{i+1/2e_I}^{I\ (1)}\right)^2 \leq 0$,25. Поэтому

$$\left| V_{i+1/2e_I}^{I (2)} \right| \le \left| V_{i+1/2e_I}^{I (1)} \right| - \left(V_{i+1/2e_I}^{I (1)} \right)^2 + \frac{1}{2} \left| V_{i+1/2e_I}^{I (1)} \right| \sum_{I=1, J \ne I}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{J (1)} \right|. \tag{1.29}$$

т. к. $\sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I \ (1)} \right| \equiv \mathcal{C}_i$, то, суммируя (1.29) по *I*, получим:

$$\sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I(2)} \right| \le C_i + \frac{1}{2} (C_i)^2 - \frac{3}{2} \sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I(1)} \right|^2. \tag{1.30}$$

С использованием алгебраического неравенства Коши-Буняковского $\sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I~(1)} \right|^2 \geq \frac{(C_i)^2}{M}$ неравенство (1.30) принимает вид:

$$\sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I(2)} \right| \le C_i + \frac{1}{2} \cdot \frac{M-3}{M} (C_i)^2. \tag{1.31}$$

При $M \leq 3$ правая часть (1.31) меньше или равна C_i , поэтому окончательно имеем выполнение условия устойчивости для схемы с двумя итерациями

$$\forall n, \forall i = (i_1, \dots, i_M) \colon \sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I(2)} \right| \le \sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I(1)} \right|, \tag{1.32}$$

и, аналогично, для схем с большим числом итераций

$$\forall n, \forall i = (i_1, \dots, i_M) \colon \sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I \ (l+1)} \right| \le \sum_{I=1}^{M} \left| V_{i+1/2e_I}^{I \ (l)} \right|. \tag{1.33}$$

Максимальное значение правой части (1.31) равно $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$, C_i для M=1,2,3 соответственно. Заметим, что поле псевдоскоростей может быть дивергентным даже при том, что исходное поле скоростей недивергентно. Поэтому для устойчивости всей схемы в целом нужно гарантировать, чтобы правая часть (1.33) была меньше или равна $\frac{1}{2}$. Как показано выше, это выполняется при M=1,2, а при M=3 необходимо потребовать $\mathfrak{C} \leq \frac{1}{2}$ в (1.27).

Итак, поскольку каждая итерация алгоритма имеет форму донорской схемы, то выполнение условия устойчивости (1.27) гарантирует устойчивость, положительную определенность и монотонность схемы каждой итерации.

1.2 Схема "чехарда"

В работах [3,6] для решения уравнения переноса в мезомасштабной модели использовалась схема "чехарда", которая применительно к уравнению (1.1) в многомерном случае выглядит следующим образом:

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^{n-1}}{2\Delta t} + \sum_{I=1}^M L_I(v_I \psi_i^n) = R^n, \tag{1.34}$$

где M — количество пространственных переменных, $i=(i_1,...,i_M),e_I$ — единичный вектор в i-ом направлении пространственной переменной, и

$$L_{I}(v_{I}\psi_{i}^{n}) = \frac{v_{i+e_{I}}\psi_{i+e_{I}}^{n} - v_{i-e_{I}}\psi_{i-e_{I}}^{n}}{2\Delta x^{I}}.$$
(1.35)

Для устойчивости по Нейману схемы "чехарда" требуется выполнение условия, аналогичного (1.27) [13].

Структура формул (1.34) - (1.35) такова, что вычислительная сетка подобна шахматной доске: решение, строящееся для "черных полей", оказывается совершенно независимым от решения для "белых полей". Это может привести к появлению двух расщепившихся решений. Поэтому во всех экспериментах со схемой "чехарда" в работах [3,6] дополнительно применялся временной фильтр Робера-Асселина (1.36) с параметром $\gamma=0.01$:

$$\bar{\psi}^n = \psi^n + \gamma(\psi^{n+1} - 2\psi^n + \bar{\psi}^{n-1}). \tag{1.36}$$

Необходимое помимо ψ^0 начальное распределение ψ^1 вычислено по схеме:

$$\frac{\psi_i^1 - \psi_i^0}{\Delta t} + \sum_{l=1}^M L_l(v_l \psi_i^0) = R^0.$$
 (1.37)

Таким образом, хотя схема "чехарда" и имеет второй порядок точности, в действительности точность может ухудшиться из-за схемы, применяемой на первом шаге.

Схема "чехарда" не является монотонной и не сохраняет свойство положительной определенности. Это накладывает значительные ограничения на возможность применения схемы для переноса знакоположительных термодинамических величин, таких как масса или концентрация вещества.

1.3 Двумерный тест

В данном разделе уравнение переноса $\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\psi) + \frac{\partial}{\partial y}(v\psi) = 0$ рассматривается в безразмерном виде. В качестве области (x,y) взят квадрат 100×100 с сеткой $N_x \times N_y$, где $N_x = 101, N_y = 101$, шаги сетки обозначены как $\Delta x, \Delta y$. Вектор скорости (u,v) задан в круге радиуса R=33 и имеет вид $(u,v)=\omega \left(-(y-y_0),(x-x_0)\right)$, означающий вращение вокруг точки $(x_0,y_0)=(50,50)$ с постоянной угловой скоростью $\omega=\frac{\pi}{3}\cdot 0$,1. Вне круга радиуса R=33 поток ослабевает по экспоненциальному закону и на границах квадрата стремится к 0. Для этого векторного поля скорости выполняется условие $\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0$.

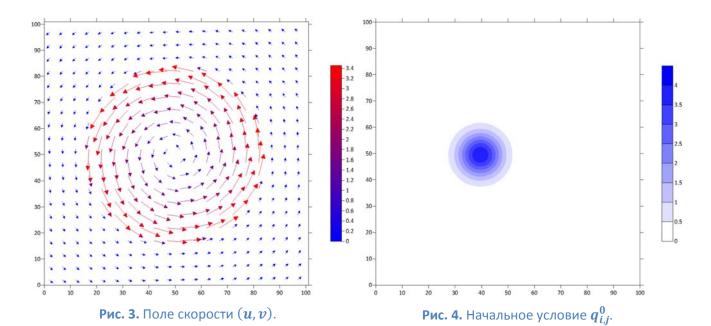
Начальное условие представляет собой имитацию выброса массы в окрестности точки $(x_1, y_1) = (40, 50)$ с помощью двумерной функции Гаусса (1.38) при $\sigma = 6$:

$$q_{i,j}^{0} = 4 \cdot exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^{2}} \left[(x_{i} - x_{1})^{2} + (y_{j} - y_{1})^{2} \right] \right\},$$

$$i = 0, ..., 100, j = 0, ..., 100.$$
(1.38)

Граничные условия предполагаются периодическими при $i=0,100\ \mbox{V}\ j=0,100.$

Максимальное число Куранта для всех рассмотренных в этом разделе комбинаций $\Delta x, \Delta y, \Delta t$ выполняется в силу выбора условия max(|U|+|V|)=0.47.



1.3.1 Решение по схеме *MPDATA*

Тест выполнялся для решения двумерного уравнения переноса по донорской схеме первого порядка точности (1 итерация), а также для решений второго порядка точности с компенсацией ошибок по формуле (1.18) посредством 2, 4, и 8 итераций. Один полный оборот вокруг центра вращения происходит за время $600\Delta t$. На первой серии рисунков (рис. 5, a-г) показаны решения, соответствующие всем указанным значениям итераций, через 150 шагов по времени. На второй серии рисунков (рис. 6, a-г) — через 300 шагов по времени, третья серия рисунков (рис. 7, a-г) выполнена через 450 шагов по времени, четвертая (рис. 8, a-г) — через 600 шагов по времени, т. е. по завершении полного оборота. Из рис. 5-8 видно, что процессы компенсации ошибок путем 2 и 4 итераций (рис. 5-8, 6-в) вносят существенное улучшение в численное решение по донорской схеме (рис. 5-8, a), в то время как дальнейшее увеличение числа итераций слабо влияет на решение (рис. 5-8, г).

В табл. 1-4 представлены различные нормы отклонений численного решения $q^{ ext{числ}}$ от точного решения q в момент времени $t=n\Delta t$:

$$C_h$$
- нормы: $\Delta(q)_{C_h} = \max_{i,j} |q_{i,j}^n|^{\text{числ}} - q_{i,j}^n|, \ \delta(q)_{C_h} = \frac{\max_{i,j} |q_{i,j}^n|^{\text{числ}} - q_{i,j}^n|}{\max_{i,j} |q_{i,j}^n|^{\text{числ}}|},$ (1.39)

$$L_{1,h}\text{- норма:} \qquad \qquad \delta(q)_{L_{1,h}} = \frac{\sum_{i,j} \left|q_{i,j}^{n_{\text{числ}}} - q_{i,j}^{n}\right| \Delta x \Delta y}{\sum_{i,j} \left|q_{i,j}^{n_{\text{числ}}} \right| \Delta x \Delta y}, \tag{1.40}$$

$$L_{2,h}\text{- норма:} \qquad \qquad \delta(q)_{L_{1,h}} = \frac{\sum_{i,j} \left(q_{i,j}^{n} \,^{\text{числ}} - q_{i,j}^{n}\right)^{2} \Delta x \Delta y}{\sum_{i,j} \left(q_{i,j}^{n} \,^{\text{числ}}\right)^{2} \Delta x \Delta y}. \tag{1.41}$$

В первых колонках табл. 1-4 стоит номер n шага по времени, при котором произведен расчет общей «массы» примеси — $\sum_{i,j} q_{i,j}^{ ext{числ}}$ (вторые колонки таблиц), и норм (1.39)-(1.41) (все остальные колонки).

Для значений норм, представленных в табл. 1-4, схема *MPDATA* уже с 2 итерациями обеспечивает второй порядок точности. Так например, при n=2400, уменьшая в 2 раза $\Delta x, \Delta y$ и Δt , получим уменьшение соответствующих норм более, чем в 4 раза (табл. 2, а-б), уменьшая $\Delta x, \Delta y$ и Δt в 4 раза, получаем уменьшение норм более, чем в 16 раз (табл. 2, а,в). В то же время результаты, полученные с применением одной только донорской схемы *MPDATA*, указывают на порядок точности не выше

первого. Из табл. 1-4 также следует, что при увеличении числа итераций от 1 до 2 и от 2 до 4 точность решения существенно возрастает, а от 4 до 8 — практически не изменяется.

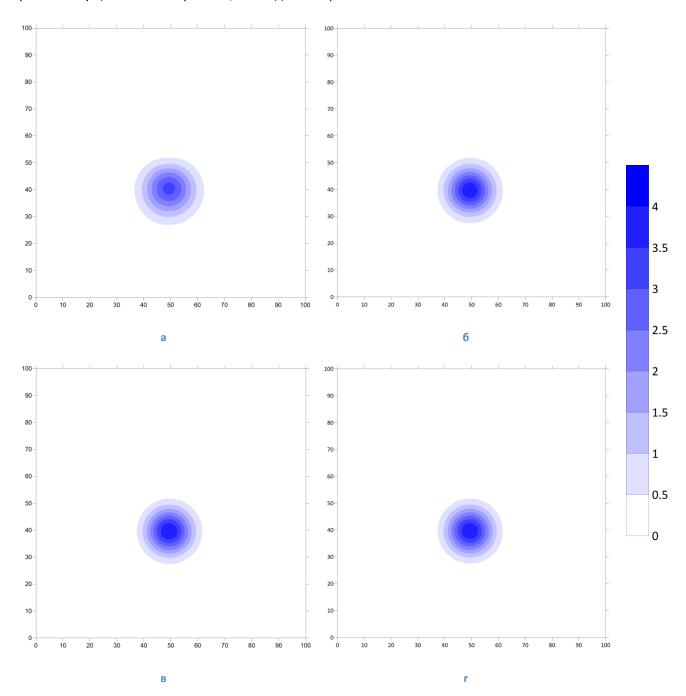


Рис. 5. Численное решение двумерного теста по схеме *MPDATA* через 150 шагов по времени при $\Delta t = 0, 1$: а – по донорской схеме, б-г – с компенсацией ошибок за 2, 4, и 8 итераций соответственно.

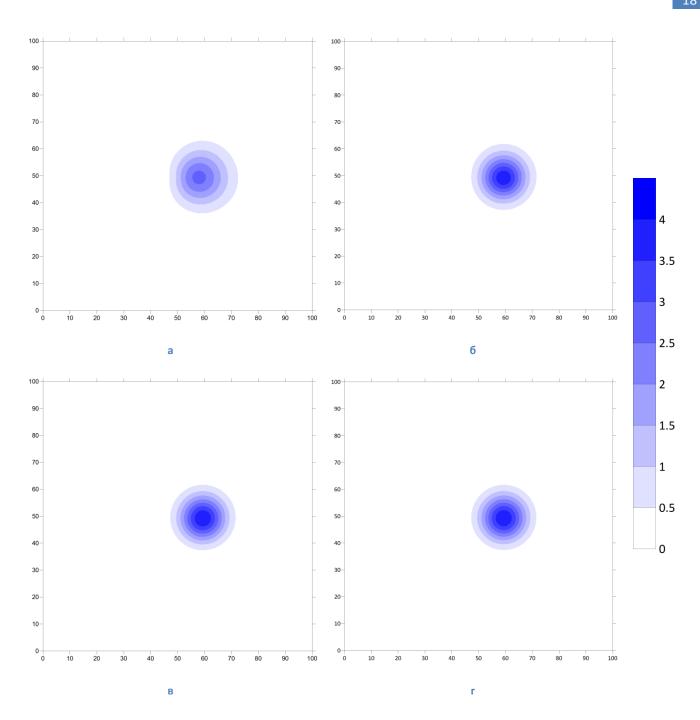


Рис. 6. Численное решение двумерного теста по схеме *MPDATA* через 300 шагов по времени при $\Delta t = 0, 1$: а – по донорской схеме, б-г – с компенсацией ошибок за 2, 4, и 8 итераций соответственно.

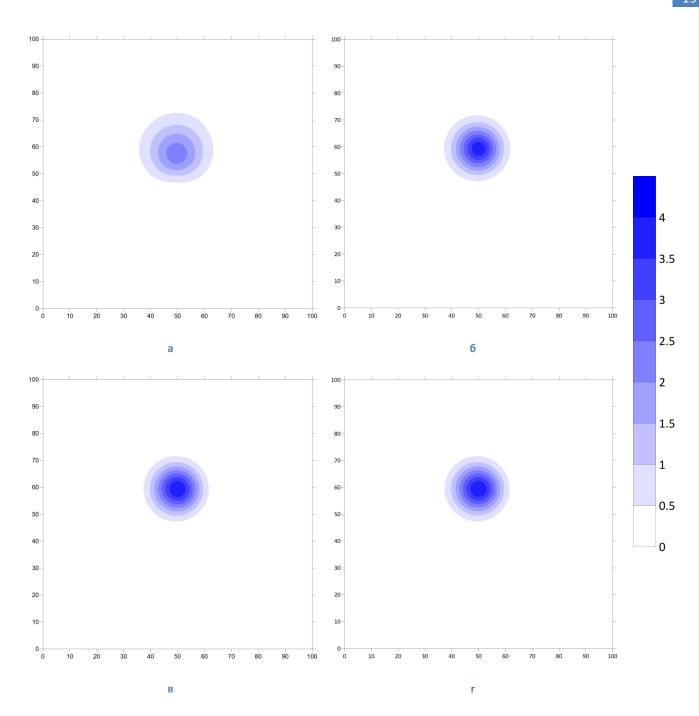


Рис. 7. Численное решение двумерного теста по схеме *MPDATA* через 450 шагов по времени при $\Delta t = 0, 1$: а – по донорской схеме, б-г – с компенсацией ошибок за 2, 4, и 8 итераций соответственно.

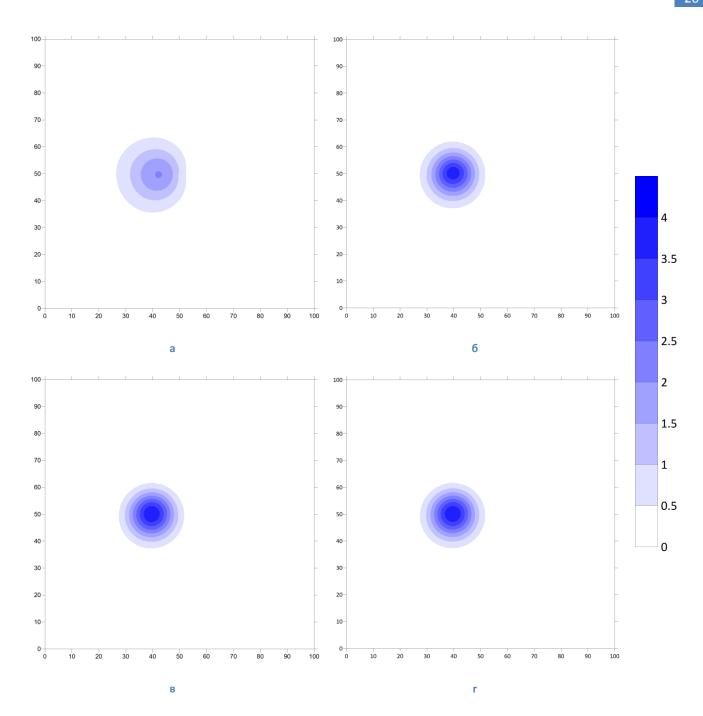


Рис. 8. Численное решение двумерного теста по схеме *MPDATA* через 600 шагов по времени при $\Delta t = 0, 1$: а – по донорской схеме, б-г – с компенсацией ошибок за 2, 4, и 8 итераций соответственно.

Табл. 1. C_h -норма и относительные C_h , $L_{1,h}$, $L_{2,h}$ – нормы отклонений численного решения от точного по донорской схеме в различные моменты времени $t=n\cdot \Delta t$: а - $\Delta x=\Delta y=1$, $\Delta t=0,1$, б - $\Delta x=\Delta y=0,5$, $\Delta t=0,05$, в - $\Delta x=\Delta y=0,25$, $\Delta t=0,025$

 $\delta(q)_{L_{2,h}}$ n mass $\Delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{L_{1,h}}$ 0 0 0 0 0 904.778684227512 600 904.778684214080 2.100359 1.034169 0.549548 0.403961 1200 904.778684214077 2.757774 2.001594 0.838835 1.247405 904.778684214081 1800 3.096735 2.962601 1.026800 2.327392 2400 904.778684214080 3.299084 3.307655 1.160680 3.518753 3000 904.778684214078 3.432232 3.441149 1.260860 4.691350 $\delta(q)_{L_{1,h}}$ $\delta(q)_{L_{2,h}}$ n mass $\Delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{C_h}$ 0 0 904.778684225049 0 0 0 1200 904.778684218345 1.423290 0.531576 0.329869 0.121833 2400 904.778684218348 2.100913 1.034589 0.549911 0.404198 3600 904.778684218341 0.789870 2.503149 1.525549 0.7127324800 904.778684218347 2.770995 2.011688 0.840230 1.254769 6000 904.778684218341 2.961463 2.495463 0.943757 1.783318 $\delta(q)_{L_{1,h}}$ $\delta(q)_{L_{2,h}}$ $\Delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{C_h}$ n mass 904.778684223582 0 0 0 2400 904.778684220218 0.867099 0.271087 0.184669 0.034386 4800 904.778684220217 1.423583 0.531824 0.329906 0.121809 7200 904.778684220214 1.813539 0.247708 0.786074 0.449235 9600 904.778684220214 2.102369 1.035601 0.550057 0.404062 0.586098 12000 904.778684220229 2.325909 1.282161 0.637012

Табл. 2. C_h -норма и относительные C_h , $L_{1,h}$, $L_{2,h}$ - нормы отклонений численного решения от точного по схеме с компенсацией ошибки за 2 итерации в различные моменты времени $t=n\cdot \Delta t$: а - $\Delta x=\Delta y=1$, $\Delta t=0,1$, б - $\Delta x=\Delta y=0,5$, $\Delta t=0,05$, в - $\Delta x=\Delta y=0,25$, $\Delta t=0,025$

 $\delta(q)_{L_{2,h}}$ n mass $\Delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{L_{1,h}}$ 0 0 0 0 0 904.778684227512 600 904.778684214077 0.393443 0.102523 0.087433 0.006253 1200 904.778684214081 0.715779 0.199041 0.159996 0.022429 904.778684214080 0.046256 1800 0.975890 0.288225 0.223270 2400 904.778684214078 1.197682 0.376332 0.279574 0.076243 3000 904.778684214077 1.379936 0.461429 0.330292 0.111250 $\delta(q)_{L_{1,h}}$ $\delta(q)_{L_{2,h}}$ n mass $\Delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{C_h}$ 0 0 904.778684225049 0 0 0 1200 904.778684218342 0.106702 0.026837 0.023960 0.000430 2400 904.778684218345 0.208294 0.052819 0.046173 0.001655 3600 904.778684218343 0.077804 0.067163 0.003591 0.303380 4800 904.778684218341 0.395002 0.102645 0.087183 0.006178 6000 904.778684218348 0.480660 0.126623 0.106336 0.009365 $\delta(q)_{L_{1,h}}$ $\delta(q)_{L_{2,h}}$ $\Delta(q)_{C_h}$ $\delta(q)_{C_h}$ n mass 904.778684223582 0 0 0 2400 904.778684220219 0.027209 0.006807 0.006271 2.7e-005 4800 904.778684220219 0.054023 0.013534 0.012250 0.000109 7200 904.778684220225 0.080496 0.020193 0.018125 0.000242 9600 904.778684220218 0.106640 0.026794 0.023897 0.000427

0.000660

904.778684220211

0.132387

0.033325

0.029571

12000

Табл. 3. C_h -норма и относительные C_h , $L_{1,h}$, $L_{2,h}$ -нормы отклонений численного решения от точного по схеме с компенсацией ошибки за 4 итерации в различные моменты времени $t=n\cdot \Delta t$: а - $\Delta x=\Delta y=1$, $\Delta t=0,1$, $\delta -\Delta x=\Delta y=0,5$, $\Delta t=0,05$, в - $\Delta x=\Delta y=0,25$, $\Delta t=0,025$

		а			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684227512	0	0	0	0
600	904.778684214076	0.199395	0.050308	0.043649	0.001901
1200	904.778684214076	0.389859	0.099319	0.086391	0.007360
1800	904.778684214075	0.571225	0.147838	0.127852	0.015881
2400	904.778684214079	0.725424	0.190668	0.165884	0.026662
3000	904.778684214079	0.862591	0.231441	0.198915	0.038549
		б			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684225049	0	0	0	0
1200	904.778684218339	0.050716	0.012692	0.011119	0.000120
2400	904.778684218336	0.100843	0.025269	0.022038	0.000479
3600	904.778684218338	0.151613	0.038027	0.032950	0.001074
4800	904.778684218342	0.202007	0.050762	0.043857	0.001901
6000	904.778684218350	0.253075	0.063766	0.054762	0.002956
		В			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684223582	0	0	0	0
2400	904.778684220193	0.012657	0.003164	0.002941	7.5e-006
4800	904.778684220199	0.025270	0.006319	0.005690	3.0e-005
7200	904.778684220214	0.037830	0.009462	0.008442	6.7e-005
9600	904.778684220216	0.050484	0.012628	0.011188	0.000120
12000	904.778684220215	0.063173	0.015804	0.013931	0.000187

Табл. 4. C_h -норма и относительные C_h , $L_{1,h}$, $L_{2,h}$ -нормы отклонений численного решения от точного по схеме с компенсацией ошибки за 8 итераций в различные моменты времени $t=n\cdot \Delta t$: а - $\Delta x=\Delta y=1$, $\Delta t=0,1$, $\delta -\Delta x=\Delta y=0,5$, $\Delta t=0,05$, в - $\Delta x=\Delta y=0,25$, $\Delta t=0,025$

		а			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684227512	0	0	0	0
600	904.778684214078	0.199601	0.050362	0.043921	0.001905
1200	904.778684214074	0.394165	0.100422	0.087451	0.007413
1800	904.778684214080	0.577283	0.149398	0.130439	0.016167
2400	904.778684214078	0.737064	0.193654	0.169817	0.027297
3000	904.778684214078	0.876307	0.234938	0.203743	0.039460
		б			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684225049	0	0	0	0
1200	904.778684218327	0.050613	0.012666	0.011124	0.000120
2400	904.778684218331	0.101060	0.025323	0.022056	0.000479
3600	904.778684218334	0.151933	0.038107	0.032990	0.001074
4800	904.778684218329	0.202512	0.050889	0.043930	0.001902
6000	904.778684218328	0.253695	0.063923	0.054875	0.002959
		В			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684223582	0	0	0	0
2400	904.778684220186	0.012651	0.003163	0.002939	7.5e-006
4800	904.778684220181	0.025257	0.006316	0.005687	3.0e-005
7200	904.778684220171	0.037834	0.009463	0.008439	6.7e-005
9600	904.778684220165	0.050509	0.012634	0.011185	0.000120
12000	904.778684220147	0.063208	0.015812	0.013929	0.000187

1.3.2 Решение по схеме "чехарда"

При $\Delta t=0.1$ один полный оборот вокруг центра вращения происходит за время $600\Delta t$. На рис. 9 а-г показаны численные решения по схеме чехарда через 150, 300, 450 и 600 шагов по времени, возникающие в узлах сетки отрицательные значения помечены красным цветом. Наличие отрицательных значений подтверждает отсутствие свойства положительной определенности.

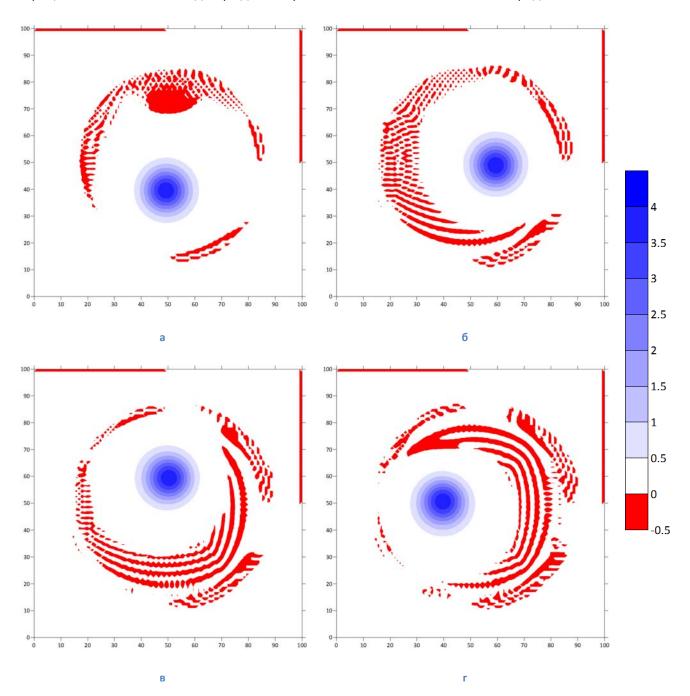


Рис. 9. Численное решение двумерного теста по схеме "чехарда" при $\Delta t = 0, 1$: а – через 150 шагов, б – через 300, в – через 450, г – через 600 шагов по времени.

Табл. 5. C_h -норма и относительные C_h , $L_{1,h}$, $L_{2,h}$ — нормы отклонений численного решения от точного по схеме "чехарда" в различные моменты времени $t=n\cdot \Delta t$: а - $\Delta x=\Delta y=1$, $\Delta t=0,1$, б - $\Delta x=\Delta y=0,5$, $\Delta t=0,05$, в - $\Delta x=\Delta y=0,25$, $\Delta t=0,025$

		а			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684227512	0	0	0	0
600	904.783280265366	0.412691	0.103659	0.088914	0.008856
1200	904.785610817207	0.815858	0.207689	0.178789	0.034356
1800	904.788249315309	1.172327	0.303520	0.267747	0.073773
2400	904.794420886864	1.483061	0.390215	0.353375	0.123713
3000	904.790013432453	1.726018	0.464516	0.433395	0.180916
б					
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684225049	0	0	0	0
1200	904.779109666295	0.196527	0.049136	0.049953	0.002560
2400	904.778931543067	0.396340	0.099172	0.099526	0.010200
3600	904.778735445401	0.596127	0.149390	0.148984	0.022798
4800	904.779085549509	0.794130	0.199492	0.198295	0.040154
6000	904.779224768405	0.990212	0.249210	0.247455	0.062003
		В			
n	mass	$\Delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{C_h}$	$\delta(q)_{L_{1,h}}$	$\delta(q)_{L_{2,h}}$
0	904.778684223582	0	0	0	0
2400	904.778617285489	0.144498	0.036128	0.044085	0.001634
4800	904.778843751876	0.289291	0.072312	0.087826	0.006524
7200	904.778787811666	0.434017	0.108511	0.131429	0.014638
9600	904.778782465370	0.578662	0.144667	0.174866	0.025920
12000	904.778849453678	0.722422	0.180624	0.180624	0.040293

В табл. 5 представлены различные нормы отклонений численного решения $q^{\text{числ}}$ от точного решения q в момент времени $t=n\Delta t$. В первой колонке таблицы стоит номер n шага по времени, при

котором произведен расчет общей «массы» примеси — $\sum_{i,j} q_{i,j}^{\text{числ}}$ (вторая колонка), и норм (1.39)-(1.41) (все остальные колонки). Для ряда значений норм, представленных в табл. 5, второй порядок точности схемы "чехарда" не выполняется, что связано, по-видимому, с недостаточной точностью схемы, применяемой на первом шаге.

1.4 Трехмерный тест

В данном разделе уравнение переноса $\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\psi) + \frac{\partial}{\partial y}(v\psi) + \frac{\partial}{\partial z}(w\psi) = 0$ также рассматривается в безразмерном виде. Область (x,y,z) выбрана в виде куба $100 \times 100 \times 100$ с сеткой $N_x \times N_y \times N_z$, где $N_x = 101$, $N_y = 101$, $N_z = 101$, шаги сетки обозначены как $\Delta x, \Delta y, \Delta z$. Векторное поле скорости (u,v,w) задано в цилиндре радиуса R=33 и имеет вид: $(u,v,w)=\left(-\omega(y-y_0),\omega(x-x_0),\frac{5}{3}\right)$, что представляет собой вращение по спирали вокруг оси $(x_0,y_0,z)=(50,50,z)$ с постоянной горизонтальной угловой скоростью $\omega=\frac{\pi}{3}\cdot 0$,1 и постоянной вертикальной скоростью $w_0=\frac{5}{3}$. Вне цилиндра радиуса R=33 поток ослабевает по экспоненциальному закону и на границах куба стремится к 0. Для этого потока выполняется $\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}=0$.

Начальное условие имитирует выброс загрязнения в окрестности точки $(x_1, y_1, z_1) = (50, 50, 35)$ с помощью трёхмерной функции Гаусса (1.42) при $\sigma = 4$:

$$q_{i,j,k}^{0} = 4 \cdot exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^{2}} \left[(x_{i} - x_{1})^{2} + (y_{j} - y_{1})^{2} + (z_{k} - z_{1})^{2} \right] \right\},$$

$$i = 0, ..., 100, j = 0, ..., 100, k = 0, ..., 100.$$
(1.42)

Граничные условия приняты периодическими при $i=0,100\ V\ j=0,100\ V\ k=0,100.$

В обсуждаемых ниже численных экспериментах шаг по времени $\Delta t = 0.05$, шаги сетки $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$, так что максимальное число Куранта max(|U| + |V| + |W|) = 0.32. Начальное распределение примеси и векторное поле скорости приведены на рис. 10.

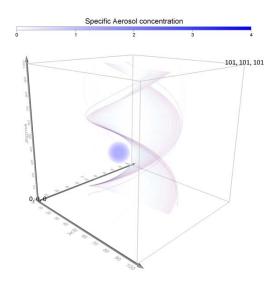


Рис. 10. Распределение $q_{i,i,k}^0$ и поток (u,v,w)

1.4.1 Решение по схеме МРДАТА

Как и для двумерного теста, решение трехмерного уравнения переноса было вначале найдено по донорской схеме первого порядка точности (1 итерация), а затем с компенсацией ошибок с помощью 2, 4, и 8 итераций. Один полный оборот вокруг оси вращения происходит за время $1200\Delta t$, подъем на высоту куба при выбранной скорости w — тоже за время $1200\Delta t$. На первой серии рисунков (рис. 11, а-г) показаны решения, соответствующие всем указанным значениям итераций, через 600 шагов по времени. Вторая серия рисунков (рис. 12, а-г) выполнена через 1200 шагов по времени, т. е. в тот момент, когда центр функции Гаусса должен был бы вернуться в первоначальное положение.

Как и в двумерном тесте, точность решения существенно возрастает с увеличением числа итераций от 1 до 2 и от 2 до 4. При увеличении числа итераций от 4 до 8 существенных изменений решения по схеме *MPDATA* не происходит.

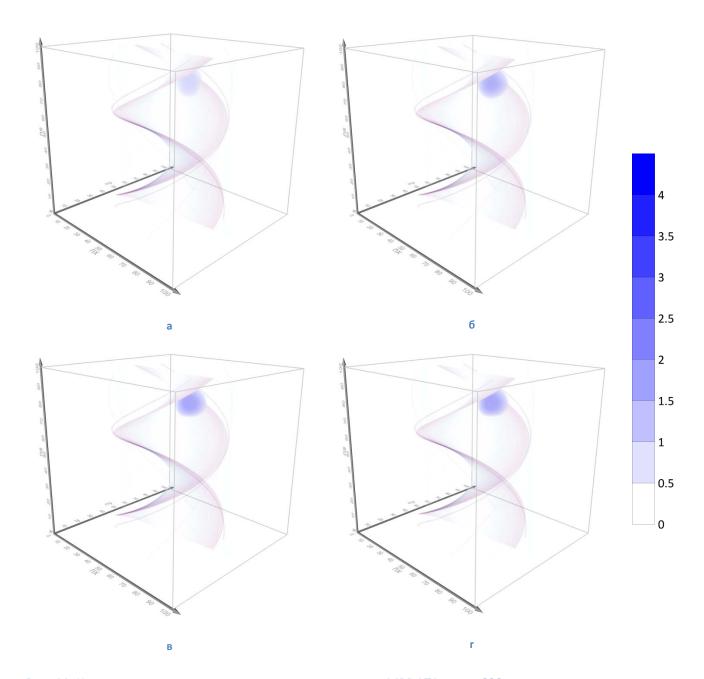


Рис. 11. Численное решение трехмерного теста по схеме *MPDATA* через 600 шагов по времени: а – по донорской схеме, б-г – с компенсацией ошибок за 2, 4, и 8 итераций соответственно.

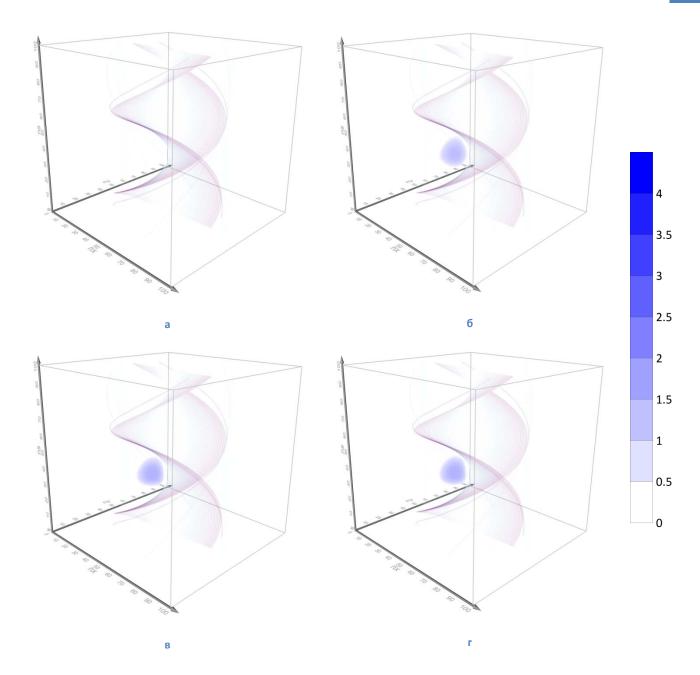


Рис. 12 – Численное решение трехмерного теста по схеме *MPDATA* через 1200 шагов по времени: а – по донорской схеме, б-г – с компенсацией ошибок за 2, 4, и 8 итераций соответственно.

1.4.2 Решение по схеме "чехарда"

На рис. 13 показаны численные решения по схеме "чехарда" через 600 и 1200 шагов по времени, отрицательные значения выделены красным цветом.

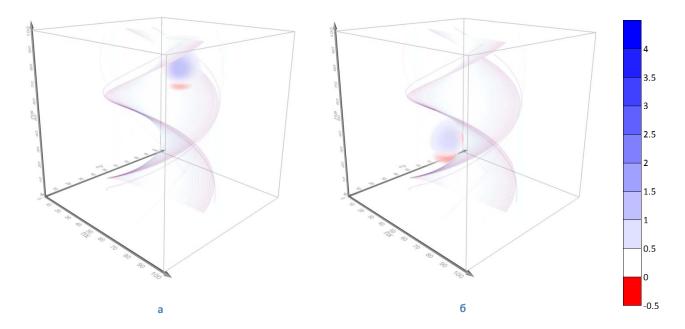


Рис. 13. Численное решение трехмерного теста по схеме "чехарда" при Δt =0,05: а — через 600 шагов, б — через 1200 шагов по времени.

2 Мезомасштабное моделирование переноса примеси

В данном разделе рассматривается задача о переносе примеси по схемам "чехарда" и *MPDATA* в рамках мезомасштабной модели. Приводятся результаты тестовых расчётов для сравнительного анализа двух схем и длительного численного эксперимента по схеме *MPDATA* для реальной территории в Западной Сибири. Блок переноса пассивной примеси подключен к мезомасштабной модели *NH3D* — совместной модели атмосферы и подстилающей поверхности с одномерной параметризацией гидрологических объектов. Основные компоненты модели представлены на рис. 14.



Рис. 14. Компоненты модели NH3D

Соответствующие уравнения негидростатической системы гидротермодинамики атмосферы, записанные в σ - системе координат, представлены в работах [5, 6, 14] следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t}(up_*) + \frac{\partial}{\partial x}(u^2p_*) + \frac{\partial}{\partial y}(vup_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}up_*) = -p_*\frac{\partial \phi'}{\partial x} + \sigma\frac{\partial p_*}{\partial x}\frac{\partial \phi'}{\partial \sigma} + f(v - V_g)p_* + p_*(D_u + R_u), \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(vp_*) + \frac{\partial}{\partial x}(uvp_*) + \frac{\partial}{\partial y}(v^2p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}vp_*) = -p_*\frac{\partial \phi'}{\partial y} + \sigma\frac{\partial p_*}{\partial y}\frac{\partial \phi'}{\partial \sigma} + f(u - U_g)p_* + p_*(D_v + R_v), \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\widetilde{w}p_*) + \frac{\partial}{\partial x}(u\widetilde{w}p_*) + \frac{\partial}{\partial y}(v\widetilde{w}p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}\widetilde{w}p_*) = S_v p_* \frac{\partial \phi'}{\partial \sigma} + p_* g\left(\frac{\theta}{\theta_{vS}} - q_r\right) + p_* (D_w + R_w), \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta'p_*) + \frac{\partial}{\partial x}(u\theta'p_*) + \frac{\partial}{\partial y}(v\theta'p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}\theta'p_*) = -S_v\tilde{w}p_* \frac{\partial\theta_{vS}}{\partial\sigma} + p_* \frac{L_v}{c_p} \left(\frac{p_0}{p}\right)^k (C - E) + p_*(D_\theta + R_\theta), \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial p_*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(up_*) + \frac{\partial}{\partial y}(vp_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}p_*) = 0, \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(q_v p_*) + \frac{\partial}{\partial x}(uq_v p_*) + \frac{\partial}{\partial v}(vq_v p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}q_v p_*) = p_*(E - C) + p_*(D_{q_v} + R_{q_v}), \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(q_c p_*) + \frac{\partial}{\partial x}(u q_c p_*) + \frac{\partial}{\partial y}(v q_c p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma} q_c p_*) = p_*(C - A) + p_*(D_{q_c} + R_{q_c}), \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(q_r p_*) + \frac{\partial}{\partial x}(uq_r p_*) + \frac{\partial}{\partial y}(vq_r p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}q_r p_*) = p_*(A - E) - g\frac{\partial}{\partial \sigma}(\rho V_r q_r) + p_*(D_{q_r} + R_{q_r}). \tag{2.8}$$

Здесь t — время, x,y — горизонтальные координаты, $\sigma = \frac{(p-p_t)}{(p_{Surf}-p_t)}$ — вертикальная σ - координата.

Переменные и обозначения, используемые в уравнениях (2.1)-(2.8), содержатся в табл. 6.

Величины D_i , где $i=u,v,w,\theta,...$ описывают турбулентную диффузию соответствующих переменных, R_i , где $i=u,v,w,\theta,...$ — некоторые дополнительные слагаемые, описывающие внешние вынуждающие силы. Термодинамические переменные в системе представлены в терминах мезомасштабных отклонений (обозначены штрихами) от характеристик фонового состояния. Величины, снабженные нижним индексом S, относятся к фоновому состоянию в гидростатике, которое характеризуется только давлением. Кроме уравнений для трех компонент скорости, уравнений притока тепла и неразрывности (2.1)-(2.5), в систему также входят прогностические уравнения для концентрации атмосферной влаги в трех ее состояниях: водяного пара, облачных и дождевых капель (2.6)-(2.8).

Табл. 6. Список переменных и обозначений в уравнениях модели NH3D

обозначение	переменные и параметры	размерность
u, v	горизонтальные составляющие скорости ветра	м/с
φ	геопотенциал	м ² /с ²
p, p_t, p_{Surf}, p_0	давление, давление на верхней границе, давление на поверхности Земли, 10^5 Па	Па
p_*	$p_* = p_{Surf} - p_t$	Па
f	параметр Кориолиса	c ⁻¹
U_g, V_g	составляющие геострофического ветра	м/с
T , T_v	температура, виртуальная температура	К

c_p	удельная теплоемкость воздуха при постоянном давлении	<u>Дж</u> кг · К
R_d	удельная газовая постоянная для сухого воздуха	<u>Дж</u> кг · К
g	ускорение свободного падения	м/c ²
k	$\frac{R_d}{c_p}$	-
$oldsymbol{ heta}_v$	$T_v(rac{p}{p_0})^k$ - виртуальная потенциальная температура	К
L_v	удельная теплота испарения/конденсации	Дж/кг
σ	аналог вертикальной скорости в σ-системе координат	c ⁻¹
w	$-rac{RT_{VS}p_*}{gp}(\dot{\sigma}+rac{\sigma}{p_*}\dot{p_*})$	м/с
S_v	$\frac{gp}{T_{vs}p_*}$	_M -1
q_v	удельная влажность	кг/кг
q_c	концентрация облачных капель	кг/кг
q_r	концентрация дождевых капель	кг/кг
q_{np}	концентрация примеси	кг/кг
V_r	скорость падения дождевых капель	м/с
ρ	плотность	кг/м ³
A	суммарная интенсивность захвата облачных капель осадками и автоконверсии	<u>кг · с</u>
С	интенсивность конденсации водяного пара	<u>кг</u> кг · с
E	интенсивность испарения капель	<u>кг кг с</u>

Начальные поля прогностических величин в модели *NH3D* определяются с помощью вертикальных профилей, заданных на произвольной сетке. На предварительном этапе они интерполируются на σ -сетку и используются для инициализации соответствующих сеточных массивов. Для численных экспериментов с моделью будем использовать единую конфигурацию с вертикальными распределениями потенциальной температуры и влажности, показанными на рис. 15.

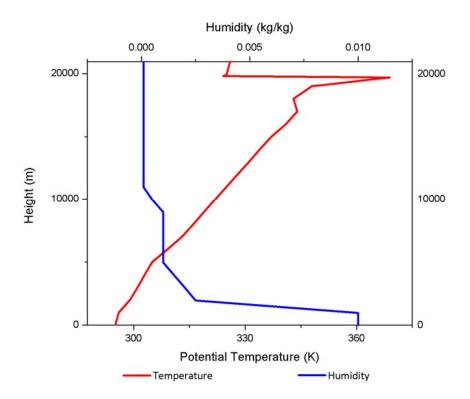


Рис. 15. Вертикальные распределения потенциальной температуры и влажности

Приземное давление задано постоянным на нижней границе и равным 10^5 Па, вертикальное распределение давления расчитывается по уравнению гидростатики. Начальные значения компонент скоростей ветра равны нулю. Их изменение со временем в отсутствие фоновой составляющей в модели происходит главным образом за счёт пространственной неоднородности подстилающей поверхности.

2.1 Применение схем *MPDATA* и "чехарда" для решения уравнения переноса пассивной примеси в мезомасштабной модели

Процесс переноса мезомасштабными течениями пассивной примеси, выбрасываемой в атмосферу из источников на поверхности Земли, был промоделирован в модели *NH3D* подобно тому, как это сделано в (2.6) для переноса водяного пара:

$$\frac{\partial}{\partial t} (q_{np} p_*) + \frac{\partial}{\partial x} (u q_{np} p_*) + \frac{\partial}{\partial y} (v q_{np} p_*) + \frac{\partial}{\partial \sigma} (\dot{\sigma} q_{np} p_*) = p_* \left(D_{q_{np}} + R_{q_{np}} \right). \tag{2.9}$$

Обозначения уравнения (2.9) приведены в табл. 6.

Турбулентная диффузия примеси определяется соотношением:

$$D_{q_{np}} = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial Q_1}{\partial x} + \frac{\partial Q_2}{\partial y} + \frac{\partial Q_3}{\partial z} \right), \tag{2.10}$$

где Q_j , j=1,2,3- компоненты вектора турбулентного потока примеси. В данной работе положим $D_{q_{np}}=R_{q_{np}}=0$ и обозначая для краткости $q=q_{np}p_*$, получим уравнение

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uq) + \frac{\partial}{\partial y}(vq) + \frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}q) = 0. \tag{2.11}$$

Предполагая заданными граничные условия Дирихле (т. е. $q_{i,j,k}^n$ заданы для всех n при $i=0,N_x \vee j=0,N_y \vee k=0,N_s$), применим метод *MPDATA* к (2.9). Донорская схема:

$$q_{i,j,k}^{n+1} = q_{i,j,k}^{n} - \left[F\left(q_{i,j,k}^{n}, q_{i+1,j,k}^{n}, U_{i+1/2,j,k}\right) - F\left(q_{i-1,j,k}^{n}, q_{i,j,k}^{n}, U_{i-1/2,j,k}\right) \right]$$

$$- \left[F\left(q_{i,j,k}^{n}, q_{i,j+1,k}^{n}, V_{i,j+1/2,k}\right) - F\left(q_{i,j-1,k}^{n}, q_{i,j,k}^{n}, V_{i,j-1/2,k}\right) \right]$$

$$- \left[F\left(q_{i,j,k}^{n}, q_{i,j,k+1}^{n}, S_{i,j+1/2,k}\right) - F\left(q_{i,j,k-1}^{n}, q_{i,j,k}^{n}, S_{i,j,k-1/2}\right) \right],$$

$$i = 1, ..., N_{\gamma} - 1, \quad j = 1, ..., N_{\gamma} - 1, \quad k = 1, ..., N_{S} - 1.$$

$$(2.12)$$

Пары $U_{i+1/2,j,k}$ и $U_{i-1/2,j,k}$, $V_{i,j+1/2,k}$ и $V_{i,j-1/2,k}$ и $S_{i,j+1/2,k}$ и $S_{i,j,k-1/2}$ — локальные числа Куранта:

$$U_{i\pm 1/2,j,k} = u_{i\pm 1/2,j,k}^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x'},$$

$$V_{i,j\pm 1/2,k} = v_{i,j\pm 1/2,k}^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta y'},$$

$$S_{i,j\pm 1/2,k} = \dot{\sigma}_{i,j,k\pm 1/2}^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\sigma_{k+1} - \sigma_{k}'},$$
(2.13)

$$u_{i\pm 1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{1}{4} \left(u_{i,j,k}^{n} + u_{i\pm 1,j,k}^{n} + u_{i\pm 1,j,k}^{n+1} + u_{i,j,k}^{n+1} \right),$$

$$v_{i,j\pm 1/2,k}^{n+1/2} = \frac{1}{4} \left(v_{i,j,k}^{n} + v_{i,j\pm 1,k}^{n} + v_{i,j\pm 1,k}^{n+1} + v_{i,j,k}^{n+1} \right),$$

$$\dot{\sigma}_{i,j,k\pm 1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{4} \left(\dot{\sigma}_{i,j,k}^{n} + \dot{\sigma}_{i,j,k\pm 1}^{n} + \dot{\sigma}_{i,j,k\pm 1}^{n+1} + \dot{\sigma}_{i,j,k}^{n+1} \right)$$
(2.14)

$$i = 1, ..., N_x - 1, j = 1, ... N_y - 1, k = 1, ... N_s - 1.$$

Заметим, что $U_{(i+1)-1/2,j,k}^{n+1/2}=U_{i+1/2,j,k}^{n+1/2},\ u_{(i+1)-1/2,j,k}^{n+1/2}=u_{i+1/2,j,k}^{n+1/2},\$ поэтому U и u в (2.13) и (2.14) будем вычислять при $i=0,\ldots,N_x-1,\ j=1,\ldots,N_y-1,\ k=1,\ldots,N_s-1,\$ используя затем в (2.12) нужные значения. Аналогично V и v вычисляем в (2.13) и (2.14) при $i=1,\ldots,N_x-1,\ j=0,\ldots,N_y-1,$ $k=1,\ldots,N_s-1,\$ $k=1,\ldots,N_s-1,\$ $k=1,\ldots,N_s-1,\$ $k=1,\ldots,N_s-1,\$ $k=1,\ldots,N_s-1,\$

Строим итерации с учетом ошибки:

$$\begin{aligned} q_{i,j,k}^{(l)} &= q_{i,j,k}^{(l-1)} - \\ &- \left[F\left(q_{i,j,k}^{(l-1)}, q_{i+1,j,k}^{(l-1)}, U_{i+1/2,j,k}^{(l)}\right) - F\left(q_{i-1,j,k}^{(l-1)}, q_{i,j,k}^{(l-1)}, U_{i-1/2,j,k}^{(l)}\right) \right] \\ &- \left[F\left(q_{i,j,k}^{(l-1)}, q_{i,j+1,k}^{(l-1)}, V_{i,j+1/2,k}^{(l)}\right) - F\left(q_{i,j-1,k}^{(l-1)}, q_{i,j,k}^{(l-1)}, V_{i,j+1/2,k}^{(l)}\right) \right] \\ &- \left[F\left(q_{i,j,k}^{(l-1)}, q_{i,j,k+1}^{(l-1)}, S_{i,j+1/2,k}^{(l)}\right) - F\left(q_{i,j,k-1}^{(l-1)}, q_{i,j,k}^{(l-1)}, S_{i,j,k-1/2}^{(l)}\right) \right], \\ &i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 1, \dots N_y - 1, \quad k = 1, \dots N_s - 1, \quad l = 1, \dots I ord. \end{aligned}$$

Для соленоидального потока $\overline{\mathbb{V}}\cdot \bar{v}=0$, где $\bar{v}=(u,v,\dot{\sigma})$. Согласно схеме *MPDATA* для псевдоскоростей $U_{i+1/2,j,k}^{(l)}$ имеем:

$$U_{i+1/2,j,k}^{(l+1)} = \left[\left| U_{i+1/2,j,k}^{(l)} \right| - \left(U_{i+1/2,j,k}^{(l)} \right)^{2} \right] \cdot \frac{q_{i+1,j,k}^{(l)} - q_{i,j,k}^{(l)}}{q_{i+1,j,k}^{(l)} + q_{i,j,k}^{(l)}} - \frac{1}{2} \left(U_{i+1/2,j,k}^{(l)} \cdot \overline{V_{i+1/2,j,k}^{(l)}} \cdot \frac{q_{i+1,j+1,k}^{(l)} + q_{i,j+1,k}^{(l)} - q_{i+1,j-1,k}^{(l)} - q_{i,j-1,k}^{(l)}}{q_{i+1,j+1,k}^{(l)} + q_{i,j+1,k}^{(l)} + q_{i+1,j-1,k}^{(l)} + q_{i,j-1,k}^{(l)}} \right)$$

$$-\frac{1}{2} \left(U_{i+1/2,j,k}^{(l)} \cdot \overline{S_{i+1/2,j,k}^{(l)}} \cdot \frac{q_{i+1,j,k+1}^{(l)} + q_{i,j,k+1}^{(l)} - q_{i+1,j,k-1}^{(l)} - q_{i,j,k-1}^{(l)}}{q_{i+1,j,k+1}^{(l)} + q_{i,j,k+1}^{(l)} + q_{i+1,j,k-1}^{(l)} + q_{i,j,k-1}^{(l)}} \right),$$

$$(2.16)$$

где

$$\overline{V_{i+1/2,j,k}^{(l)}} = \frac{1}{4} \left(V_{i+1,j+1/2,k}^{(l)} + V_{i,j+1/2,k}^{(l)} + V_{i+1,j-1/2,k}^{(l)} + V_{i,j-1/2,k}^{(l)} \right),$$

$$\overline{S_{i+1/2,j,k}^{(l)}} = \frac{1}{4} \left(S_{i+1,j,k+1/2}^{(l)} + S_{i,j,k+1/2}^{(l)} + S_{i+1,j,k-1/2}^{(l)} + S_{i,j,k-1/2}^{(l)} \right),$$
(2.17)

$$i = 0, ..., N_x - 1, j = 1, ..., N_y - 1, k = 1, ..., N_s - 1.$$

По формуле (2.16) при $i=1,\dots,N_{\chi}-1$ вычисляются все значения $U_{i+1/2,j,k}^{(l+1)}$, а при $i=0,\dots,N_{\chi}-2$ вычисляются все значения $U_{i-1/2,j,k}^{(l+1)}$.

Аналогичные формулы для псевдоскоростей $V_{i,j+1/2,k}^{(l)}$ и $S_{i,j,k+1/2}^{(l)}$ имеют вид:

$$V_{i+1/2,j,k}^{(l+1)} = \left[\left| V_{i,j+1/2,k}^{(l)} \right| - \left(V_{i,j+1/2,k}^{(l)} \right)^{2} \right] \cdot \frac{q_{i,j+1,k}^{(l)} - q_{i,j,k}^{(l)}}{q_{i,j+1,k}^{(l)} + q_{i,j,k}^{(l)}} - \frac{1}{2} \left(V_{i+1/2,j,k}^{(l)} \cdot \overline{U_{i+1/2,j,k}^{(l)}} \cdot \frac{q_{i+1,j+1,k}^{(l)} + q_{i+1,j,k}^{(l)} - q_{i-1,j+1,k}^{(l)} - q_{i-1,j,k}^{(l)}}{q_{i+1,j+1,k}^{(l)} + q_{i+1,j,k}^{(l)} + q_{i-1,j+1,k}^{(l)} + q_{i-1,j,k}^{(l)}} \right)$$

$$-\frac{1}{2} \left(V_{i+1/2,j,k}^{(l)} \cdot \overline{S_{i+1/2,j,k}^{(l)}} \cdot \frac{q_{i,j+1,k+1}^{(l)} + q_{i,j,k+1}^{(l)} - q_{i,j+1,k-1}^{(l)} - q_{i,j,k-1}^{(l)}}{q_{i+1,j,k+1}^{(l)} + q_{i,j,k+1}^{(l)} + q_{i+1,j,k-1}^{(l)} + q_{i,j,k-1}^{(l)}} \right),$$

$$(2.18)$$

где

$$\overline{U_{i+1/2,j,k}^{(l)}} = \frac{1}{4} \left(U_{i+1/2,j+1,k}^{(l)} + U_{i+1/2,j+1,k}^{(l)} + U_{i-1/2,j+1,k}^{(l)} + U_{i-1/2,j,k}^{(l)} \right),$$

$$\overline{S_{i+1/2,j,k}^{(l)}} = \frac{1}{4} \left(S_{i,j+1,k+1/2}^{(l)} + S_{i,j,k+1/2}^{(l)} + S_{i,j+1,k-1/2}^{(l)} + S_{i,j,k-1/2}^{(l)} \right),$$

$$i = 1, \dots, N_r - 1, \quad j = 0, \dots, N_r - 1, \quad k = 1, \dots, N_s - 1.$$
(2.19)

$$S_{i,j+1/2,k}^{(l+1)} = \left[\left| S_{i,j,k+1/2}^{(l)} \right| - \left(S_{i,j,k+1/2}^{(l)} \right)^{2} \right] \cdot \frac{q_{i,j,k+1}^{(l)} - q_{i,j,k}^{(l)}}{q_{i,j,k+1}^{(l)} + q_{i,j,k}^{(l)}} - \frac{1}{2} \left(S_{i,j+1/2,k}^{(l)} \cdot \overline{U_{i,j,k+1/2}^{(l)}} \cdot \frac{q_{i+1,j,k+1}^{(l)} + q_{i+1,j,k}^{(l)} - q_{i-1,j,k+1}^{(l)} - q_{i-1,j,k}^{(l)}}{q_{i+1,j,k+1}^{(l)} + q_{i+1,j,k}^{(l)} + q_{i-1,j,k+1}^{(l)} + q_{i-1,j,k}^{(l)}} \right)$$

$$- \frac{1}{2} \left(S_{i+1/2,j,k}^{(l)} \cdot \overline{V_{i,j,k+1/2}^{(l)}} \cdot \frac{q_{i,j+1,k+1}^{(l)} + q_{i,j+1,k}^{(l)} - q_{i,j-1,k+1}^{(l)} - q_{i,j-1,k}^{(l)}}{q_{i,j+1,k+1}^{(l)} + q_{i,j+1,k}^{(l)} + q_{i,j-1,k+1}^{(l)} + q_{i,j-1,k}^{(l)}} \right),$$

$$(2.20)$$

$$\overline{U_{i,j,k+1/2}^{(l)}} = \frac{1}{4} \left(V_{i+1/2,j,k+1}^{(l)} + V_{i+1/2,j,k}^{(l)} + V_{i-1/2,j,k+1}^{(l)} + V_{i-1/2,j,k}^{(l)} \right),$$

$$\overline{V_{i,j,k+1/2}^{(l)}} = \frac{1}{4} \left(S_{i,j+1/2,k+1}^{(l)} + S_{i,j+1/2,k}^{(l)} + S_{i,j-1/2,k+1}^{(l)} + S_{i,j-1/2,k}^{(l)} \right),$$

$$i = 1, \dots, N_{\chi} - 1, \quad j = 0, \dots, N_{\chi} - 1, \quad k = 1, \dots, N_{S} - 1.$$
(2.21)

Для дивергентного потока $\overline{\nabla} \cdot \overline{v} \neq 0$, и в (2.16), (2.18), (2.20) появляются дополнительные слагаемые:

$$-\frac{1}{4}U_{i+1/2,j,k}^{(l)} \cdot \left(U_{i+3/2,j,k}^{(l)} - U_{i-1/2,j,k}^{(l)}\right) - \frac{1}{4}U_{i+1/2,j,k}^{(l)}$$

$$\cdot \left[\left(V_{i+1,j+1/2,k}^{(l)} + V_{i,j+1/2,k}^{(l)} - V_{i+1,j-1/2,k}^{(l)} - V_{i,j-1/2,k}^{(l)}\right) + \left(S_{i+1,j,k+1/2}^{(l)} + S_{i,j,k+1/2}^{(l)} - S_{i+1,j,k-1/2}^{(l)} - S_{i,j,k-1/2}^{(l)}\right)\right]$$
(2.22)

к $U_{i+1/2,j,k}^{(l+1)}$;

$$-\frac{1}{4}V_{i,j+1/2,k}^{(l)} \cdot \left(V_{i,j+3/2,k}^{(l)} - V_{i,j-1/2,k}^{(l)}\right) - \frac{1}{4}V_{i,j+1/2,k}^{(l)}$$

$$\cdot \left[\left(U_{i+1/2,j+1,k}^{(l)} + V_{i+1/2,j,k}^{(l)} - V_{i-1/2,j+1,k}^{(l)} - V_{i-1/2,j,k}^{(l)}\right) + \left(S_{i,j+1,k+1/2}^{(l)} + S_{i,j,k+1/2}^{(l)} - S_{i,j+1,k-1/2}^{(l)} - S_{i,j,k-1/2}^{(l)}\right) \right]$$
(2.23)

к $V_{i+1/2,j,k}^{(l+1)}$;

$$-\frac{1}{4}S_{i,j,k+1/2}^{(l)} \cdot \left(S_{i,j,k+3/2}^{(l)} - S_{i,j,k-1/2}^{(l)}\right) - \frac{1}{4}S_{i,j,k+1/2}^{(l)}$$

$$\cdot \left[\left(U_{i+1/2,j,k+1}^{(l)} + U_{i+1/2,j,k}^{(l)} - U_{i-1/2,j,k+1}^{(l)} - U_{i-1/2,j,k}^{(l)}\right) + \left(V_{i,j+1/2,k+1}^{(l)} + V_{i,j+1/2,k}^{(l)} - V_{i,j-1/2,k+1}^{(l)} - V_{i,j-1/2,k}^{(l)}\right) \right]$$

$$(2.24)$$

к $S_{i,j+1/2,k}^{(l+1)}$.

Применительно к уравнению (2.9) в модели NH3D схема "чехарда" была реализована следующим образом:

$$-\frac{1}{2\Delta t} \left(\left(q_{np} p_* \right)_{i,j,k}^{n+1} - \left(q_{np} p_* \right)_{i,j,k}^{n-1} \right)$$

$$= L_x \left(\left(u q_{np} p_* \right)_{i,j,k}^n \right) + L_y \left(\left(v q_{np} p_* \right)_{i,j,k}^n \right) + L_\sigma \left(\left(\dot{\sigma} q_{np} p_* \right)_{i,j,k}^n \right)$$
(2.25)

где

$$L_{x}(f_{i,j,k}^{n}) = \frac{f_{i+1,j,k}^{n} - f_{i-1,j,k}^{n}}{2\Delta x}, L_{y}(f_{i,j,k}^{n}) = \frac{f_{i,j+1,k}^{n} - f_{i,j-1,k}^{n}}{2\Delta y},$$

$$L_{\sigma}(f_{i,j,k}^{n}) = \frac{f_{i,j,k+1}^{n} - f_{i,j,k-1}^{n}}{\sigma_{k+1} - \sigma_{k-1}}$$
(2.26)

При этом неотрицательность значений концентрации на каждом шаге по времени обеспечивалось следующим преобразованием:

$$q_{i,i,k}^n := \max(0, q_{i,i,k}^n).$$
 (2.27)

2.2 Сравнительный анализ результатов тестовых расчётов с использованием схем "чехарда" и *MPDATA*

Для сравнения двух схем рассмотрена модельная задача о переносе примеси на сетке $39 \times 39 \times 22$ с периодическим источником, находящимся в т. $(i_1,j_1,k_1)=(15,16,3)$ на берегу озера эллиптической формы с центром в точке $(i_0,j_0)=(20,20)$, малой полуосью $R_{min}=4$ шага сетки по горизонтали и большой полуосью $R_{max}=7$ шагам сетки. На каждом шаге по времени ($\Delta t=10$ сек) периодический источник выбрасывает в воздух 0,001 кг примеси. Начальная концентрация примеси представлена на рис. 16.

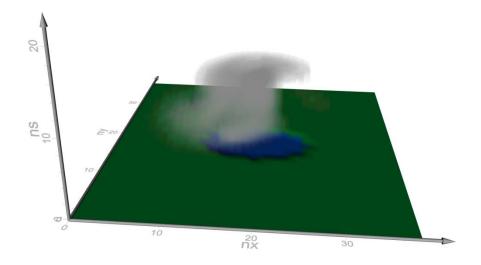


Рис. 16. Начальное распределение примеси

Начиная интегрирование в 6 ч утра при малых скоростях ветра, следует ожидать, что ко второй половине дня "облако" примеси над озером будет рассеяно в сторону суши, т.е. в направлении дневного бриза. На рис. 17, 18 представлены полученные на 16 час распределения концентрации примеси по двум численным схемам.

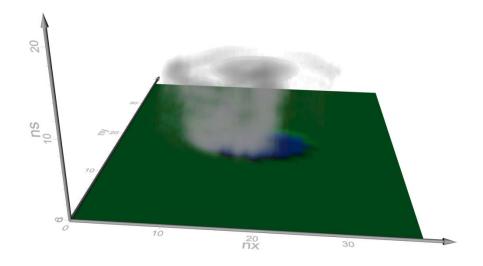


Рис. 17. Распределение примеси в 16:00 первого дня интегрирования по схеме *MPDATA*

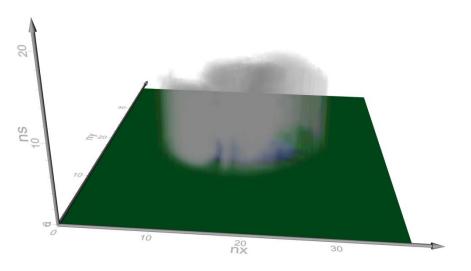


Рис. 18. Распределение примеси в 16:00 первого для интегрирования по схеме «чехарда»

Несмотря на то, что обе схемы обеспечивают сохранение полной массы вещества, в случае схемы "чехарда" значительным может быть вклад отрицательных значений. По этой причине масса примеси в расчётной области на 16:00 по схеме "чехарда" вследствие обнуления отрицательных элементов, как это показано в (2.27), более чем в 2 раза превышает полученную по положительно определённой схеме MPDATA. Поэтому решение подобных практических задач с применением схемы "чехарда" может привести к некорректной интерпретации результатов.

2.3 Моделирование переноса примеси над Западной Сибирью

Моделирование переноса пассивной примеси на основе схемы *MPDATA* было применено для анализа распространения атмосферного аэрозоля от источника, расположенного вблизи г. Сургут в Ханты-Мансийском автономном округе (Западная Сибирь). Для этого была использована карта

распределения водных объектов бассейна Средней Оби. Горизонтальная сетка 48×48 точек соответствует области 178×178 км (разрешение составляет 3.7 км), количество уровней по вертикали равно 21. Периодический источник примеси помещён на берегу реки Обь в 25 км от г. Сургут в точке $(i_1, j_1, k_1) = (15, 26, 3)$. На каждом шаге по времени источник выбрасывает в воздух 0,001 кг примеси. Интегрирование велось в течение 10 суток с шагом 5 секунд.

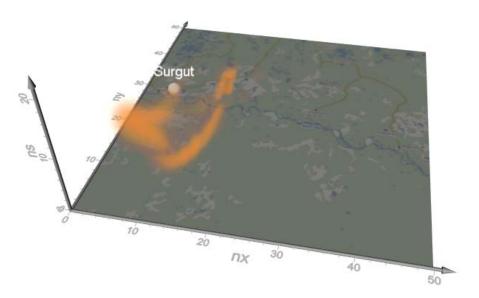


Рис. 19. Распространение примеси перпендикулярно руслу реки в 13:00 третьего дня интегрирования

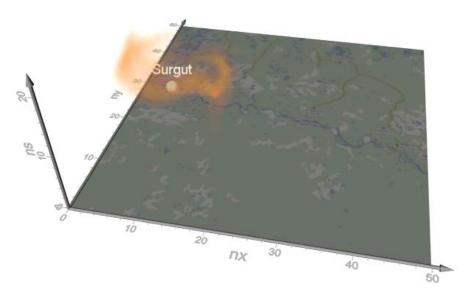
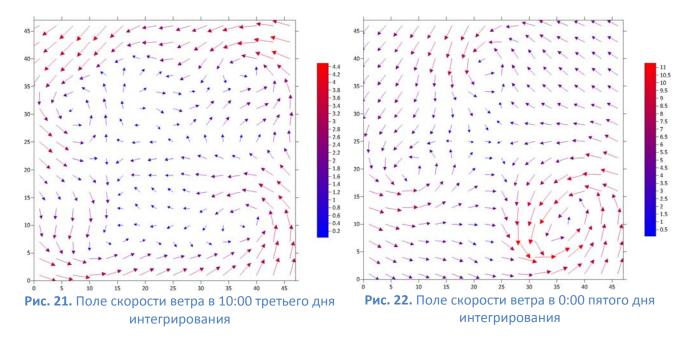


Рис. 20. Вращение облака примеси в атмосферном вихре в 0:00 пятого дня интегрирования

Некоторые интересные явления, наблюдавшиеся в ходе интегрирования модели, представлены на рис. 19 и 20. В 13 ч третьих суток наблюдается узконаправленный вынос примеси перпендикулярно руслу реки (рис. 19). Сформировавшееся за 3 часа до этого поле скоростей ветра в приземном слое

представлено на рис. 21. В другой момент времени, в полночь на пятые сутки, облако примеси, как показано на рис. 20, оказалось в зоне активного перемешивания вблизи города, что в реальной обстановке могло бы отрицательно сказаться на экологической обстановке в населённом районе.



В использованном в данной работе варианте модели отсутствует рельеф подстилающей поверхности, не учитываются процессы конденсации (облакообразования), влажного вымывания и гравитационного оседания аэрозоля, принято грубое сеточное разрешение. Несмотря на всё это, схема *MPDATA* демонстрирует вполне физически адекватную динамику переноса примеси мезомасштабными атмосферными циркуляциями.

3 Программная реализация

Схема *MPDATA* реализована в виде высокоуровневой объектно-ориентированной библиотеки классов с возможностью взаимодействия с программами на языках более низкого уровня, таких, как *С* или *Fortran*. Для того чтобы разгрузить предметный пакет алгоритма, набор вспомогательных структур и абстракций помещён в отдельную библиотеку, краткое описание которой дано в настоящем разделе. Также приведены прототипы основных функций и *UML*-диаграмма класса схемы *MPDATA*.

3.1 Инструментарий

В отдельную библиотеку выделены компоненты, которые не имеют прямого отношения к алгоритму, специализирующиеся на хранении и операциях с многомерными массивами данных. В частности, она содержит следующие структуры:

- <u>Абстрактные данные</u> это базовая структура, которую расширяют нижеперечисленные типы. Основные задачи выделение памяти под данные, выравнивание адресов (к выровненным по степени двойки адресам быстрее осуществляется доступ), быстрое копирование (клонирование). Так же реализованы базовые методы *MPI*-пересылок: экземпляр структуры может передать свою копию назначенным узлам, или, наоборот, получить данные в свою область памяти.
- Сеточная переменная (*GridVariable*) небольшие структуры-контейнеры, расширение абстрактных данных, в которых область данных рассматривается, как двумерный или трёхмерный массив со связанной функциональностью: ввод/вывод в различных форматах, взятие сечений, подмножеств, операции линейной алгебры, проверка на *NaN*, поэлементный доступ и др. В заголовке хранится информация о размерностях. Методы *MPI*-пересылок становятся предметными: в терминах сеточных переменных пересылаются уже не абстрактные вектора данных, а массивы с конкретными размерностями. Реализуется распределённая передача, основанная на взятии сечений и подмножеств, возможно, с overlap-ом, т.е. с дублированием вблизи границ разделения. Любая прогностическая переменная модели на сетке может быть представлена, как сеточная переменная.
- Многошаговая сеточная переменная (MultilevelGridVariable) это структура, объединяющая в контейнер "каскад" из постоянного количества сеточных переменных. В этой структуре хранится вектор указателей на данные, из которого по мере необходимости могут извлекаться нужные распределения. Область применения данной структуры это, например, многошаговые по времени схемы, в которых помимо текущего поля значений требуется

хранить одно или несколько предыдущих по времени. Для того чтобы перейти на новый слой по времени, реализован метод сдвига, который по требованию уничтожает самое "старое" распределение, сдвигает остальные, а в вершине списка создаётся массив под новые расчёты (LIFO – очередь).

Все перечисленные структуры являются шаблонными, то есть для данных может быть установлен произвольный тип — целые, вещественные или составные. Например, если в шаблон сеточной переменной подставить структуру из вещественных полей, то получившийся тип будет удобен для хранения комплексных чисел или векторных данных.

3.2 Структура библиотеки

С помощью описанного инструментария схема MPDATA строится, как класс с конструктором

```
// Initialize a new instance of the transfering model class.
SmolarkiewiczTEScheme(

const unsigned int nx, const unsigned int ny, const unsigned int ns,
const double dx, const double dy, double* dsigma, const double dt,

// The wind flows. Vertical flow is taken in sigma-coordinates.
Const MultilevelGridVariable3d<double>* uFlow,
const MultilevelGridVariable3d<double>* vFlow,
const MultilevelGridVariable3d<double>* wSigmaFlow,

GridVariable3d<double>* initialConcentration,

// The initial iterations count.
Const unsigned int iord = 1);
```

(среди аргументов: параметры пространственной сетки и шаг по времени, двухшаговые сеточные переменные компонент скорости ветра, начальное распределение массы или концентрации вещества, количество внутренних итераций) и методом получения очередного распределения

с единственным параметром, на вход которого подаётся сеточная переменная с заполненными граничными узлами, а на выходе метод определяет значения внутренних узлов. Отдельный класс —

pseudo velocity – управляет компонентами потоков. При каждом вызове метода *MoveNext* создаётся очередной экземпляр pseudo velocity, производящий локальный расчёт потоков и поправок для данных скоростей ветра и концентрации. *UML*-диаграмма классов представлена на рис. 20.

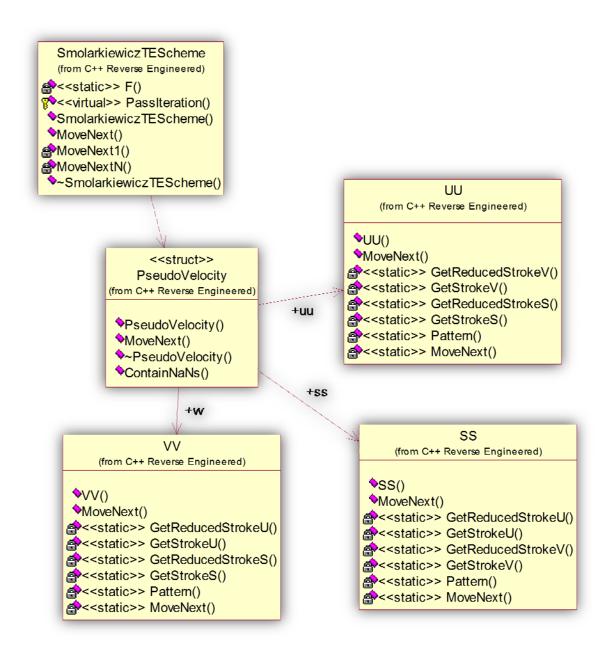


Рис. 23 – *SmolarkiewiczTEScheme UML*-диаграмма.

4 Заключение

Численные исследования, выполненные в настоящей работе, свидетельствуют о весьма ограниченной применимости схемы "чехарда", часто используемой в климатических и атмосферных моделях для решения уравнений переноса. В данной работе был реализован метод *МРDATA*, являющийся хорошей альтернативой схеме "чехарда". Проведен анализ условий устойчивости по совокупности итераций, а также монотонности и положительной определенности этого алгоритма. На двумерном и трехмерном тестовых примерах показано, что применение схемы *МРDATA* для решения уравнения переноса является более предпочтительным из-за лучшей точности и сохранения свойств монотонности и положительной определенности.

Метод *MPDATA* был адаптирован для включения в мезомасштабную модель *NH3D* — совместную модель атмосферы и подстилающей поверхности с одномерной параметризацией гидрологических объектов. В рамках этой модели проводился сравнительный анализ расчетов с использованием схем "чехарда" и *MPDATA*. Было показано, что искажение результатов, вызванное фильтрацией отрицательных значений при расчетах по схеме "чехарда", является существенным препятствием для корректной интерпретации динамики распространения примеси. С использованием схемы *MPDATA* было проведено моделирование переноса примеси над гидрологически неоднородной территорией в Западной Сибири. В работе представлены некоторые интересные моменты, наблюдавшиеся в ходе интегрирования модели.

Относительно включения схемы *MPDATA* в мезомасштабную модель имеется ряд открытых вопросов. В частности, в дальнейшем необходимо ввести расчет процесса турбулентной диффузии, выбрать подходящую параметризацию граничных условий по горизонтали, учесть обратную связь концентрации примеси с полями других прогностических величин и описать процесс ее оседания. Кроме того, проведение численных экспериментов на сетках высокого разрешения обуславливает необходимость портирования мезомасштабной модели на многопроцессорные машины, такие как вычислительный кластер СКИФ МГУ.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Василию Николаевичу Лыкосову за выбор научного направления, постоянное внимание к работе, полезные советы и замечания, Виктору Михайловичу Степаненко за многочисленные консультации по модели NH3D и физическим основам атмосферных процессов, а также Андрею Васильевичу Глазунову и Екатерине Евгеньевне Мачульской за плодотворное обсуждение при реализации схемы *MPDATA* и замечания по тексту дипломной работы. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 07-05-00200.

Литература

- 1. В. М. Степаненко, П.М. Миранда, В.Н. Лыкосов. Численное моделирование мезомасштабного взаимодействия атмосферы с гидрологически неоднородной сушей. Вычислительные технологии, 2006, т. 11, ч. 3, с. 129 136.
- 2. В. М. Степаненко. Численное моделирование взаимодействия атмосферы с водоемами суши. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, М., 2007, 159 с.
- 3. В. М. Степаненко, Д. Н. Микушин. Численное моделирование мезомасштабной динамики атмосферы и переноса примеси над гидрологически неоднородной территорией. Ж. Вычислительные Технологии (в печати).
- 4. J. L. Eastman, R. A. Pielke, and W. A. Lyons. Comparison of lake-breeze model simulations with tracer data. J. Appl. Meteor., Vol. 34, 1995, p. 1398-1418.
- 5. P. M. Miranda. Gravity waves and wave drag in flow past three dimensional isolated mountains. Phd Thesis, University of Reading, 1990, 191 pp.
- 6. Д. Н. Микушин. Численное моделирование мезомасштабных атмосферных процессов. Курсовая Работа, 4 курс, 2007, 27 с.
- 7. К. Флетчер. Вычислительные методы в динамике жидкостей. М.: 1991.
- 8. P. K. Smolarkiewicz. A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion. Journal of Computational Physics, 1984, v. 54, p. 325-362.
- 9. P. K. Smolarkiewicz, Len G. Margolin. MPDATA: A Finite-Difference Solver for Geophysical Flows. Journal of Computational Physics, 1998, v. 140, p. 459-480.
- 10. J. Michalakes, J. Dudhia, D. Gill, T. Henderson, J. Klemp, W. Skamarock, and W. Wang. The Weather Reseach and Forecast Model: Software Architecture and Performance, Proceedings of the 11th ECMWF Workshop on the Use of High Performance Computing In Meteorology, 25-29 October 2004, Reading U.K. (Ed. George Mozdzynski).
- 11. P. K. Smolarkiewicz . A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. Monthly Weather Review, 1983, v.111, p.479-486.
- Годунов С. К. Метод численного расчёта разрывных решений уравнений гидродинамики. –
 Математический сборник, 1959, т. 47 (89), № 3, с. 271-306.
- 13. П. Дж. Роуч. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.
- 14. M. A. Teixeira, and P. M. Miranda. The introduction of warm rain microphysics in the NH3D atmospheric model. Technical report, University of Lisbon, 1997, pp. 22.