

SUNTANS 模型基本原理

Stanford Unstructured Non-hydrostatic Terrain-following Adaptive
Navier-Stokes Simulator (SUNTANS)

摘要

SUNTANS 主要用来模拟近海岸区域，非静水压力引起的内波现象。有限体积法，3D 坐标，交错网格，Z 坐标分层。网格分辨率一般为数十米。原理基于自由水位和垂向扩散为半隐格式，消除表面重力波和垂向扩散项引起的稳定性限制。动量方程的其他各项使用二阶 Adams-Bashforth 格式显格式离散，使用压力校正方法计算非静水压力，达到二阶时间精度。非静水压力场采用块 Jacobi 预处理方法求解，稳定性受到重力内波波速和动量方程的垂向对流项限制，因此要求使用较小的计算时间步长。ParMETIS 库用来网格分区，达到并行分区的荷载平衡，最小化计算节点间的通信。区域分解+MPI 并行化。

1 前言

孤立内波(internal solitary waves): 沿着海岸线存在有高度非线性的孤立内波 (Carter et al., 2005)，其产生机理尚不确定，目前的理论说明：当长的、一定潮汐频率(internal tides)的内波与地形相互作用，产生非线性的能量梯级，导致能量由数千公里波长及数小时时间尺度向数十米波长和数秒时间尺度的非线性和非静水压力孤立波传播。

非静水压力计算： SUNTANS 的非静水压力公式是基于 Casulli(1999)，很多模型都拓展了非静水压力的计算模拟，如 POM, CWR-ELCOM (Hodges et al., 2000; Wadzuk et al., 2004)，一般都采取压力分离模式，即分为静水压力和非静水压力 2 个部分求解，静水压力作为预测，使流场满足沿水深积分平均的连续方程，然后计算非静水压力以满足局部连续性（自由水位变化引起？），该方法也可称为“准-静水压力”方法，因为在每一计算时间步内还没有得到非静水压力时更新计算自由水位的位置。还有一种是非静水压力算法(fully non-hydrostatic algorithm)，不分离静水压力和非静水压力，计算完整的水压力场，然后使用自由水位动力边界条件(kinematic B.C.)显式计算自由水位，如 Hodges and Street (1999)的大涡模拟 (LES)。虽然 SUNTANS 模型也是使用压力分离模式，但是确实类似于完整的压力

模拟，即可忽略每计算时间步内非静水压力对自由水位的影响，因为其数量级与整体求解的二阶时间精度的误差量级相当。(? ? ?)

尽管压力分离模式降低了非静水压力求解的计算量，但控制非静水压力的椭圆型 Poisson 方程仍然占据非静水压力模型计算量的很大一部分。试验室尺度下，Zang et al.(1994)的 LES 代码中的非静水压力模块使用多重网格求解，结合 MPI 并行计算提高了计算效率 (Cui and Street, 2000)。实际尺度下，需要对压力 Poisson 方程做预处理(共轭梯度求解算法，Casulli, 1999)，网格的 aspect ratio 明显影响预处理的效果(SUNTANS)。

计算表面重力波：快速传播的表面重力波的计算稳定性是很重要的，因为其传播速度是典型径流或重力内波波速的 100 倍。POM，FVCOM，ROMS 模型都采用模式分裂法(mode splitting)增加表面重力波计算稳定性，即相比较斜压模式(内模) 计算时间步长较大些，正压模式(外模)的计算时间步长要小些。MITgcm 模型使用向后 Euler 格式计算平面 2D 连续方程和动量方程中的正压项在来增加计算稳定性，而 Casulli (1999)和 SUNTANS 模型采用半隐 theta 法求解上述各项。表面重力波造成的稳定性限制可以采用刚盖假定来消除，这也是 MITgcm 模型的一个选项。

平面网格：Delaunay 三角网格(Shewchuck, 1996)

垂向网格分层：垂向使用 z 分层，可避免 sigma 分层(Mellor et al., 2004)和完全非结构网格(Ford et al., 2004)引起的压力梯度误差。z 分层的缺点是阶梯型床面地形，该误差可通过将非结构网格面与等深线平行来最小化，也可通过处理底部边界来改善，如：重写底部附近的有限体积离散方程(不好!)、"shaved" cells (Adcroft et al., 1997)和浸入边界法(Tseng and Ferziger, 2003)--精度高!。

SUNTANS 模型采用交错网格布置变量：仅单元面法向的速度分量布置于单元面上(相当于布置在单元的边上)；其他变量都布置在 Voronoi 点上，类似于(analogue) Cartesian 网格单元中心上(见第 3 节)(Casulli and Zanolli, 2002)。FVCOM 模型：水平流速分量布置在单元中心(centroid)，其他变量布置在节点上。SCHISM 模型：水平流速分量布置于单元边上，垂向流速布置于单元中心，水位布置于节点上，其他标量布置于棱柱体中心。

动量方程对流项离散：Casulli and Zanolli 使用半 Lagrangian 或欧拉-拉格朗日

法(ELM)，结合非结构交错网格离散，对流项通过从 Lagrangian 轨迹附近的点插值计算得到，ELM 格式的精度取决于空间插值格式的精度(Stanifort and Cote,1991)，或者说取决于计算的轨迹跟踪的位置。例如：Le Roux et al. (1997)使用 Kringing 插值格式在非结构网格上计算半 Lagrangian 的对流项。ELM 法的最大优点是稳定，缺点是不能保证动量守恒。Eulerian 格式可保证动量守恒。FVCOM 模型中使用了守恒的 Eulerian 格式离散动量对流项，SUNTANS 模型使用 Perot(2000)的欧拉格式，因为其使用显式的二阶 Adams-Bashforth (AB2)格式，因此提高了稳定性对计算时间步长的限制。标量对流不具有动量对流项的守恒计算的困难，因为标量是布置在 Voronoi 点上，只要对流项的离散格式与 3D 和平面 2D 动量方程的离散格式一致，就可保证质量在局部和全局上的整体守恒性(Gross et al., 2002)，但是当使用高阶格式将标量值插值到单元面上时，不能保证标量对流项的单调性，可在非结构网格上实施总变差减小(total variation diminishing, TVD)格式保证标量对流项的单调性，SUNTANS 模型中实施了 TVD 算法(本文没介绍)。

2 控制方程

Boussinesq 假设的 NS 方程，在 Reynolds 时间平均或 LES 框架下都使用涡粘性系数紊流模型：

动量方程：

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}u) - fv + bw &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + \nabla_H \cdot (v_H \nabla_H u) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}v) + fu &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} + \nabla_H \cdot (v_H \nabla_H v) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}w) - bu &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + \nabla_H \cdot (v_H \nabla_H w) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{g}{\rho_0} (\rho_0 + \rho)\end{aligned}$$

连续方程（不可压缩流体）

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

水平梯度算子： $\nabla_H = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y}$

静水压力： $\frac{\partial p_h}{\partial z} = -(\rho_0 + \rho)g$

非静水压力假设后，控制方程简化为：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}u) - fv + bw &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_s}{\partial x} - g \frac{\partial}{\partial x} (h+r) + \nabla_{\mathbf{H}} \cdot (\nu_{\mathbf{H}} \nabla_{\mathbf{H}} u) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_v \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\
\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}v) + fu &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q}{\partial y} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_s}{\partial y} - g \frac{\partial}{\partial y} (h+r) + \nabla_{\mathbf{H}} \cdot (\nu_{\mathbf{H}} \nabla_{\mathbf{H}} v) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}w) - bu &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q}{\partial z} + \nabla_{\mathbf{H}} \cdot (\nu_{\mathbf{H}} \nabla_{\mathbf{H}} w) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_v \frac{\partial w}{\partial z} \right)
\end{aligned}$$

水的密度 ρ 由温度 T 和盐度 s 确定。温度和盐度的标量方程：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}s) &= \nabla_{\mathbf{H}} \cdot (\gamma_{\mathbf{H}} \nabla_{\mathbf{H}} s) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_v \frac{\partial s}{\partial z} \right) \\
\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) &= \nabla_{\mathbf{H}} \cdot (\kappa_{\mathbf{H}} \nabla_{\mathbf{H}} T) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_v \frac{\partial T}{\partial z} \right)
\end{aligned}$$

忽略温度分层效应，假设密度仅与盐度呈线性关系 $\rho = \beta s$ ，则有密度输运方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\rho) = \nabla_{\mathbf{H}} \cdot (\gamma_{\mathbf{H}} \nabla_{\mathbf{H}} \rho) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_v \frac{\partial \rho}{\partial z} \right)$$

3 非结构，有限体积棱柱体及单元

平面上，SUNTANS 模型使用 Delaunay 三角网格 (Shewchuk, 1996)，某个三角单元的 3 个节点不会落入其他三角单元外切圆范围内（如图 1）。2 个 Delaunay 三角单元构成一个 Voronoi 图，连接 Delaunay 三角单元的外切圆。Voronoi 点组成 Voronoi 图的节点，连接 Voronoi 点的边垂直于 Delaunay 三角的面，这样就形成了一个正交的非结构网格。SUNTANS 模型假设网格满足这种正交性。

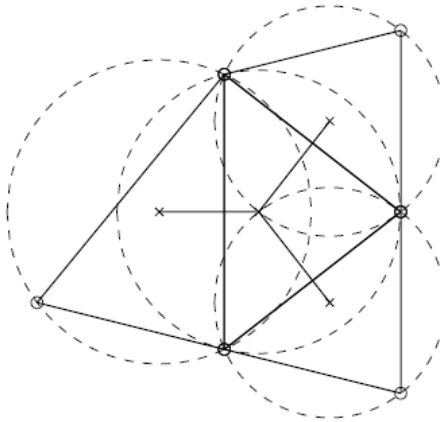


图 1 Delaunay 三角网格及 Voronoi 图

紊动粘性系数、标量的扩散系数、标量和非静水压力布置于 Voronoi 点上和

棱柱体的中心，自由水位和表面压力布置于顶部单元的 Voronoi 点上，水深布置于最底部单元的 Voronoi 点上。水平流速 U 布置于 Voronoi 和 Delaunay 边的相交处，朝向单元面的法向；垂向流速 w 布置于单元的顶部和底部的 Voronoi 点上，见图 2。

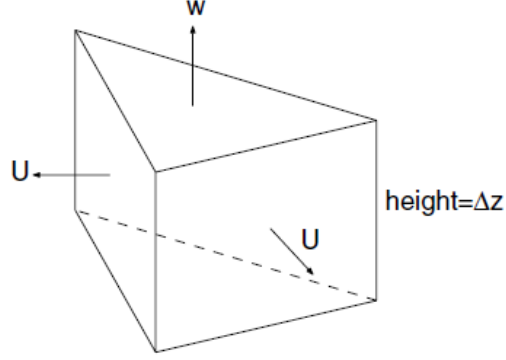


图 2 水平和垂向流速的布置位置

4 数值离散

4.1 动量方程离散

水平向动量方程：

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{n} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = & -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q}{\partial n} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_s}{\partial n} + (fv - bw)n_1 - fun_2 \\ & - g \frac{\partial}{\partial n} (h + r) + \nabla_H \cdot (v_H \nabla_H U) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial U}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

垂向动量方程：

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}w) = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q}{\partial z} + bu + \nabla_H \cdot (v_H \nabla_H w) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

使用旧时刻的压力计算 j 边和 k 层上的流速：

$$\begin{aligned} \frac{U_{j,k}^* - U_{j,k}^n}{\Delta t} = & \frac{1}{2} (3F_{j,k}^n - F_{j,k}^{n-1}) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q^{n-1/2}}{\partial n} - g\theta \frac{\partial h}{\partial n} \Big|_j^{n+1} - g(1-\theta) \frac{\partial h}{\partial n} \Big|_j^n \\ & + \theta \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v^n \frac{\partial U_{j,k}^*}{\partial z} \right) + (1-\theta) \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v^n \frac{\partial U_{j,k}^n}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \frac{w_{i,k}^* - w_{i,k}^n}{\Delta t} = & \frac{1}{2} \left(3H_{i,k}^n - H_{i,k}^{n-1} \right) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial q^{n-1/2}}{\partial z} + \theta \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v^n \frac{\partial w_{i,k}^*}{\partial z} \right) \\ & + (1-\theta) \frac{\partial}{\partial z} \left(v_v^n \frac{\partial w_{i,k}^n}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (32)$$

使用半隐格式的 θ 法(Casulli, 1999)离散垂向扩散项和自由水位项, 显式项使用二阶 Adams-Bashforth 格式离散(Zang, 1994)。在时间步 $n-1/2$, 离散计算旧时刻的非静水压力, 使用压力校正法(Armfield and Street, 2000)计算, 具有二阶时间精度。

显式项包括:

$$\begin{aligned} F_{j,k} = & -C_H(U_{j,k}) - C_V(U_{j,k}) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_s}{\partial n} - g \frac{\partial r}{\partial n} + (fv - bw)n_1 - (fu)n_2 + D_H(U_{jk}) \\ H_{i,k} = & -C_H(w_{i,k}) - C_V(w_{ik}) + bu + D_H(w_{i,k}) \end{aligned}$$

底部水平流速的边界条件采用拖拽力阻力公式:

$$v_v \frac{\partial U}{\partial z} \Big|_{z=-d}^{n+1} = C_{d,B} |U^n| U^{n+1}$$

水面边界条件施加拖拽力边界($s_{\text{top}}=0$)或风切应力($s_{\text{top}}=1$), 为:

$$v_v \frac{\partial U}{\partial z} \Big|_{z=h}^{n+1} = -(1-s_{\text{top}}) C_{d,T} |U^n| U^{n+1} + s_{\text{top}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}_s$$

垂向流速的边界条件是: 底部无通量, 水面处梯度为零。

离散的动量方程采用求逆的三对角法求解, 先计算水位, 后计算垂向扩散。

4.2 沿水深积分平均的连续方程的离散

沿水深积分平均的连续方程为:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla_H \cdot \int_{-d}^h \mathbf{u}_H dz = 0$$

使用半隐格式的 θ 法离散求解:

$$\frac{h_i^{n+1} - h_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{A_i} \theta \sum_{m=1}^{N_s} \sum_{k=1}^{N_{ke}} U_{m,k}^{n+1} \Delta z_{i,k}^{uw} N_m df_m + \frac{1}{A_i} (1-\theta) \sum_{m=1}^{N_s} \sum_{k=1}^{N_{ke}} U_{m,k}^n \Delta z_{i,k}^{uw} N_m df_m = 0$$

4.3 动量方程的对流项

离散水平和垂向动量方程的对流项和扩散项的控制体如图 4。

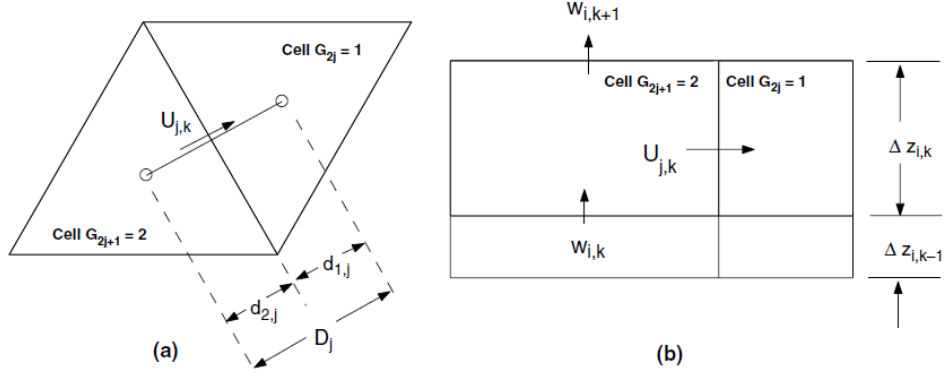


图 4 在面 j 上离散水平和垂向动量方程的控制体((a)俯视图; (b)侧视图)

参考 Perot (2000)的工作, 水平动量方程的垂向对流离散公式(图 4 中的面 j)

$$C_v(U_{j,k}) = \frac{1}{D_j} (d_{1,j} C_{1,k}^{vu} + d_{2,j} C_{2,k}^{vu})$$

垂向动量方程的垂向对流离散公式:

$$C_v(w_{i,k}) = \frac{1}{\Delta z_{i,k-1} + \Delta z_{i,k}} (w_{i,k+1}^2 - w_{i,k-1}^2)$$

除了包含自由水位的单元以外, 其他各处动量和能量守恒, 这是因为自由水位是存储于 Voronoi 点上, 而 Perot 的自由水位是存储于 Delaunay 点上 (使用非结构四面体网格)。因此, 可保证守恒性。

水平动量方程的水平对流项(图 4 的边 j 上)使用守恒形式离散(Perot, 2000):

$$C_h(U_{j,k}) = \frac{1}{D_j} (d_{1,j} C_{1,k}^{hu} + d_{2,j} C_{2,k}^{hu})$$

垂向动量方程的水平对流项以相似的形式离散:

$$C_h(w_{i,k}) = \frac{1}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k-1}} (\Delta z_{i,k-1} C_{i,k-1}^{hw} + \Delta z_{i,k} C_{i,k}^{hw})$$

因为垂向流速是存储于水平面上, 要插值到垂向面上:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{m,k+1/2} = & \frac{1}{2D_m} (d_{G_{2m+1},m} w_{G_{2m},k} + d_{G_{2m},m} w_{G_{2m+1},k}) \\ & + \frac{1}{2D_m} (d_{G_{2m+1},m} w_{G_{2m},k+1} + d_{G_{2m},m} w_{G_{2m+1},k+1}) \end{aligned}$$

4.4 动量方程的水平扩散项

水平动量方程的水平扩散项使用与对流项相同的守恒形式离散：

$$D_H(U_{j,k}) = \frac{1}{D_j} (d_{1,j} D_{1,k}^{hu} + d_{2,j} D_{2,k}^{hu})$$

$$D_{i,k}^{hu} = \frac{1}{A_i \Delta z_{i,k}} \sum_m^{N_s} (v_H)_{m,k} \mathbf{n}_j \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} \bigg|_{m,k} \Delta z_{i,k}^{uw} N_m df_m$$

其中，单元面上的法向梯度 $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} \bigg|_{m,k} = \frac{1}{D_m} (\mathbf{u}_{G_{2m},k} - \mathbf{u}_{G_{2m+1},k})$

涡粘性系数由线性插值近似计算得到：

$$(v_H)_{m,k} = \frac{1}{D_m} (d_{G_{2m+1},m} (v_H)_{G_{2\pi},k} + d_{G_{2m},m} (v_H)_{G_{2m+1},k})$$

垂向动量方程的水平扩散项也采用相似的守恒形式离散：

$$D_H(w_{i,k}) = \frac{1}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k-1}} (\Delta z_{i,k} D_{i,k}^{hw} + \Delta z_{i,k-1} D_{i,k-1}^{hw})$$

其中， $D_{i,k}^{hw} = \frac{1}{A_i \Delta z_{i,k}} \sum_m^{N_s} (v_H)_{m,k} \frac{\partial w}{\partial n} \bigg|_{m,k+1/2} \Delta z_{m,k}^{uw} N_m df_m$

垂向流速的水平向梯度近似计算：

$$\frac{\partial w}{\partial n} \bigg|_{m,k+1/2} = \frac{1}{2D_m} (w_{G_{2j},k+1} - w_{G_{2j+1},k+1} + w_{G_{2j},k} - w_{G_{2j+1},k})$$

在固体垂向边界处，对水平和垂向流速施加以下形式的阻力公式：

$$v_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} \bigg|_b = C_{dw} \left| \mathbf{u}_{G_{2b}} \right| \mathbf{u}_{G_{2b}}$$

$$v_H \frac{\partial w}{\partial n} \bigg|_b = C_{dw} \left| w_{G_{2b}} \right| w_{G_{2b}}$$

式中， b 下标代表固体垂向边界， C_{dw} 为垂向边壁的阻力系数。

4.5 标量输运方程离散

标量(s, T, ρ)的对流扩散方程为：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot (\alpha_0 \nabla \phi)$$

式中， α_0 为标量的扩散系数（分为水平和垂向扩散系数）。

守恒形式的时间离散公式为：

$$\begin{aligned} \frac{\Delta z_{i,k}^{n+1} \phi_{i,k}^{n+1} - \Delta z_{i,k}^n \phi_{i,k}^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2} (3\Phi_{i,k}^n - \Phi_{i,k}^{n-1}) \\ &- \frac{1}{A_i} \sum_m^{N_s} [\theta U_{m,k}^{n+1} + (1-\theta) U_{m,k}^n] \phi_{m,k}^n \Delta z_{m,k}^{uw} N_m df_m \\ &- \theta (w_{i,k+1}^{n+1} \phi_{i,k+1/2}^{n+1} - w_{i,k}^{n+1} \phi_{i,k-1/2}^{n+1}) - (1-\theta) (w_{i,k+1}^n \phi_{i,k+1/2}^n - w_{i,k}^n \phi_{i,k-1/2}^n) \\ &+ \theta D_\phi \phi_{i,k}^{n+1} + (1-\theta) D_\phi \phi_{i,k}^n \end{aligned} \quad (72)$$

式中， D_ϕ 为垂向扩散算子，包含垂向标量扩散系数。

垂向对流和扩散项采用 θ 法离散 (Casulli, 1999)，水平扩散项 $\Phi_{i,k}$ 采用 Adams-Bashforth 格式离散 (Zang et al., 1993)，离散公式如下：

$$\Phi_{i,k} = \frac{1}{A_i} \sum_m^{N_s} \frac{(\alpha_{0,H})_{m,k}}{D_m} (\phi_{G_{2m,k}} - \phi_{G_{2m+1,k}}) \Delta z_{m,k}^{uw} N_m df_m$$

式中，单元面上的水平标量扩散系数 $\alpha_{0,H}$ 由相邻单元线性插值得到。

因为式(72)的离散形式与水深积分平均的连续方程(38)和离散的连续方程(78)相一致，所以可保证质量守恒。

单元面上的标量值可采用多种方法计算，与采用的标量对流项离散格式有关。suntans 模型采用一阶迎风格式，尽管该格式为高扩散性（不适合与高浓度梯度的情况，需要 tvd 格式），但其计算效率较高。

4.6 非静水压力计算

由式(31)和式(32)预测计算的流速场 U^* 和 w^* 仅满足水深积分平均的 2D 连续方程，不满足局部连续性。因此，需要计算非静水压力强强制满足连续方程式(4)。该目标通过使用非静水压力校正量 qc ，校正水平和垂向流速来实现：

$$U_{j,k}^{n+1} = U_{j,k}^* - \Delta t \left(\frac{qc_{G_{2j,k}} - qc_{G_{2j+1,k}}}{D_j} \right) \quad (75)$$

$$w_{i,k}^{n+1} = w_{i,k}^* - 2\Delta t \left(\frac{qc_{i,k} - qc_{i,k-1}}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k-1}} \right) \quad (76)$$

然后，更新计算非静水压力场：

$$q_{i,k}^{n+1/2} = q_{i,k}^{n-1/2} + qc_{i,k} \quad (77)$$

在 2 个计算时间步中间($n-1/2$)计算非静水压力场(Armfield and Street, 2000)以满足 2 阶时间精度, 该方法称之为压力校正算法, 与 Casulli(1999)的方法不同(1 阶时间精度)。

在 N_s 个单元边上, 在时间步 $n+1$ 对连续方程式(4)积分, 得到用于压力校正的泊松方程, 假设在时间步 $n+1$ 的流速场的散度为零, 产生离散的连续方程:

$$A_i \left(w_{i,k+1}^{n+1} - w_{i,k}^{n+1} \right) + \sum_{m=1}^{N_s} U_{m,k}^{n+1} \Delta z_{m,k}^{uw} N_m df_m = 0 \quad (78)$$

式中, $\Delta z_{m,k}^{uw}$ 为在面 m 上的迎风面单元高度, 式(78)与沿水深积分平均连续方程离散式(38)一致(Gross et al., 2002)。将校正步(75)和(76)代入(78), 生成非静水压力校正值的 Poisson 离散方程式:

$$\mathcal{L}(qc_{i,k}) = S_{i,k}^* \quad (79)$$

式中, 源项为:

$$S_{i,k}^* = \frac{1}{\Delta t} \left[A_i \left(w_{i,k+1}^* - w_{i,k}^* \right) + \sum_{m=1}^{N_s} U_{m,k}^* \Delta z_{m,k}^{uw} N_m df_m \right] \quad (80)$$

泊松算子为:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(qc_{i,k}) = & \sum_{m=1}^{N_s} \left(\frac{qc_{N_{e_m,k}} - qc_{i,k}}{D_m} \right) \Delta z_{m,k}^{uw} df_m + \frac{2A_i}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k-1}} qc_{i,k-1} \\ & - 2A_i \left(\frac{1}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k-1}} + \frac{1}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k+1}} \right) qc_{i,k} + \frac{2A_i}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k+1}} qc_{i,k+1} \end{aligned} \quad (81)$$

使用预处理的共轭梯度法求解式(79), 预处理算子在 6.2 节中介绍。求解完(79)后, 使用式(75)可计算得到时间步 $n+1$ 的无散度水平流速场, 垂向流速场在床面边界处为 $w_{i,1}^{n+1} = 0$, 使用离散的连续方程式(78)得到垂向流速场:

$$w_{i,k+1}^{n+1} = w_{i,k}^{n+1} - \frac{1}{A_i} \sum_{m=1}^{N_s} U_{m,k}^{n+1} \Delta z_{m,k}^{uw} N_m df_m \quad (82)$$

式中, $k=1,2,\dots, N_{kc}$, N_{kc} 为流体棱柱 i 内的垂向分层数。

然后, 非静水压力场可由式(77)更新计算。

如果压力场为静水压力, 则 $qc=0$, 不要求解式(32)中的垂向动量。此种情

况下， $U^{n+1} = U^*$ ，由连续方程式(82)得到垂向流速。

非静水压力校正的边界条件在固体边界处梯度为零，在自由水面初 $qc=0$ 。开边界处，第 $n+1$ 时间步的流速已知，允许定义预测流速 $U_{ob}^* = U_{ob}^{n+1}$ ，表示施加式(75)后非静水压力无梯度的边界条件(Zang et al., 1994)。

4.7 稳定性

suntans 模型中的数值方法是质量和动量守恒的，并且因为对垂向扩散项使用了 θ 法离散和快速传播的表面重力波，因此模型计算稳定性不受这些项限制。但是，为避免使用 $\theta=0.5$ (neutrally stable, Casulli, 1990)及使用 Crank-Nicolson 格式离散正压项时引起的数值振荡，通过计算误差发现使用 $\theta=0.55$ 可抑制高频振荡并且不影响模拟结果。

suntans 模型的稳定性主要受重力内波限制，因为水平动量方程中的重力项是 Adams-Bashforth 格式显式离散。稳定性还受到水平和垂向动量方程的对流项和水平扩散项以及标量方程的水平对流项和水平扩散项的限制。非结构网格上的对流-扩散项的计算稳定性可由 2D（水平向-垂向）笛卡尔网格（水平轴平行于单元面的法向 n ）的稳定性限制条件来近似描述。根据 Fletcher（1997）推导的稳定限制公式（使用显式的中心差分离散动量方程的对流项和水平扩散项），计算时间步长受下式控制：

$$\left(\frac{|U| \Delta t}{D_j} + \frac{|w| \Delta t}{\Delta z} \right)^2 \leq \frac{2\nu_H \Delta t}{D_j^2} \leq 1 \quad (83)$$

假设对标量的水平向对流实施稳定的插值格式，标量对流方程的稳定性可由下式确定：

$$\Delta t \leq \min \left(\frac{D_j}{|U|}, \frac{D_j^2}{\max(\gamma_H, \kappa_H)} \right) \quad (84)$$

另外，如果重力内波波速为 c_i ，计算时间步长还受下式限制：

$$\Delta t \leq \frac{D_j}{c_i} \quad (85)$$

尽管计算时间步长受模拟精度的限制，实际海岸带模拟(coastal applications)的稳定性限制主要受重力内波的限制，而河口模拟(estuarine applications)的稳定

性限制主要是动量方程的垂向对流项。由较小时间步长导致的计算荷载可由通过并行计算加速计算来平衡。

5 模型验证

5.1 Non-hydrostatic internal seiche

5.2 Non-hydrostatic lock exchange

5.3 Internal waves in Monterey Bay

6 代码性能

6.1 时间精度

不可压缩流体的数值模拟时间精度很大程度上依赖于离散方法中压力项的处理以及使用的网格类型（结构或非结构）(Armfield and Street, 2000)。当使用Crank-Nicolson 格式离散粘性项时，假设其他各项都采用至少时间二阶精度的格式离散，研究表明：在非交错网格上使用投影算法(FVCOM 模型)是一阶时间精度，而使用(压力)修正算法可增加精度至二阶。

投影算法中，动量方程离散先不考虑压力项，强制满足连续方程的压力是完全的非静水压力场(q_s+q)，比如离散的控制方程可写作：

$$\begin{aligned}\mathbf{u}^* &= \mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{R}^{n+1/2} \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^* - \Delta t \mathbf{G} q^{n+1/2}\end{aligned}$$

式中， u^* 为预测流速， $R^{n+1/2}$ 为动量方程中除了非静水压力项以外的其他各项， q 为非静水压力项， \mathbf{G} 是离散计算中的梯度算子。

压力校正算法中(SUNTANS 模型采用)，离散方程写作：

$$\begin{aligned}\mathbf{u}^* &= \mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{R}^{n+1/2} - \Delta t \mathbf{G} q^{n-1/2} \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^* - \Delta t \mathbf{G} q c \\ q^{n+1/2} &= q^{n-1/2} + q c\end{aligned}$$

式中， qc 为压力校正值。

还有一种上述方法的替代算法是使用 Casulli(1999)的 θ 算法:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}^* &= \mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{R}^{n+1/2} - (1-\theta)\Delta t \mathbf{G}q^n \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^* - \theta \Delta t \mathbf{G}q^{n+1}\end{aligned}$$

自由水位的离散方法，为保证稳定性，取 $0.5 < \theta \leq 1$ 。在不考虑非静水压力时，采用 θ 算法离散垂向扩散和正压项，其他项采用二阶 Adams-Bashforth 格式离散（如对流，Coriolis 和重力项），当使用 $\theta = 0.5$ 时具有二阶精度。

使用 internal seiche 算例进行数值试验,验证 suntans 模型的时间二阶精度:

模拟 5s 的过程，采用不同的计算时间步长，计算 h, U, w, ρ, q 的误差:

$$E^2(\Delta t) = \frac{\sum_{i,k}^{N_c, N_k} (\phi_{i,k} - \phi_{i,k}^{ref})^2}{\sum_{i,k}^{N_c, N_k} (\phi_{i,k}^{ref})^2}$$

如图 17, 所有变量的计算误差均以二阶精度收敛。但是, 因为相对流速(U^n), 非静水压力在时间上是交错计算的($q^{n-1/2}$), 使用了二阶 Adams-Bashforth 外插格式计算最终时间步(n)的压力值(Armfield and Street, 2000)。每组模拟的最终压力值使用最终 2 个计算时刻的压力值计算:

$$p_{N_{\max}} = \frac{3}{2} p_{N_{\max}-1/2} - \frac{1}{2} p_{N_{\max}-3/2} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

如图 17, 不使用外插算法, 非静水压力的计算误差大约以 1.5 阶精度收敛, 而使用外插算法后可达二阶精度。图 17 还表明其他各项都具有二阶计算精度, 表明 suntans 模型确实具有整体的二阶时间精度。

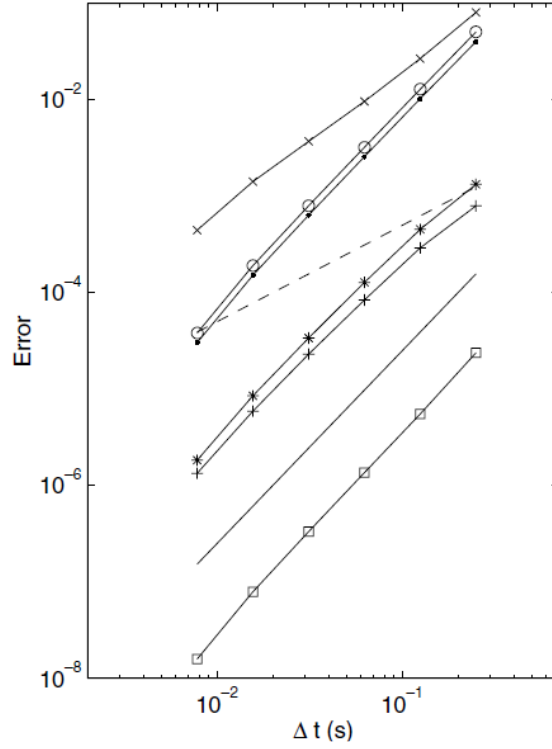


图 17 sloshing internal wave 算例的时间收敛

6.2 块 Jacobi 预处理

非静水压力校正值的 Poisson 离散方程式(79)可写作矩阵-矢量形式:

$$\mathbf{M}_i \mathbf{q}_i - \sum_{m=1}^{N_s} \frac{df_m}{D_m} (\Delta \mathbf{Z}_m \mathbf{e}_1^T) \mathbf{q}_{Nem} = -\mathbf{S}_i^* \quad (99)$$

式中, \mathbf{M}_i 是对称三角矩阵, 三角元素是 $-a_{i,k}, a_{i,k} + a_{i,k+1} + \sum_{m=1}^{N_s} \frac{df_m}{D_m} \Delta z_{m,k}^{uw}, -a_{i,k+1}$,

$$a_{i,k} = \frac{2A_i}{\Delta z_{i,k} + \Delta z_{i,k-1}} \quad (100)$$

式(99)是压力校正场的对称、正定和方程的非结构离散系统。在(结构)曲线网格的非静水压力模型中, Marshall et al., (1997)实施预处理, 在长宽比较小 (small aspect ratio) 的网格上或者当 $\epsilon_g = \Delta z_{m,k}^{uw} / \sqrt{A_i} \ll 1$, 矩阵 \mathbf{M} 是病态的 (ill-conditioned) (矩阵的最大和最小的奇异值比值很大的矩阵) -- 大部分的环境流体是这种情况。为克服该问题, 需要进行预处理。当 $\epsilon_g \ll 1$, 式(99)可近似为:

$$\overline{\mathbf{M}}_i \mathbf{q}_i = -\mathbf{S}_i^* \quad (101)$$

其中， $\overline{\mathbf{M}}_i$ 的三对角上包含 $-a_{i,k}, a_{i,k} + a_{i,k+1}$ 和 $-a_{i,k+1}$ 。矩阵 $\overline{\mathbf{M}}_i$ 构成对系统(99)进行块 Jacobi 预处理的基础。

因为 $\overline{\mathbf{M}}_i$ 是三对角矩阵，较容易实施预处理，在每一步共轭梯度迭代计算时，仅需要在每个水体棱柱内做三对角求逆计算。

对系统(99)实施预处理(101)生成：

$$\overline{\mathbf{M}}_i^{-1} \mathbf{M}_i \mathbf{q}_i - \sum_{m=1}^{N_s} \frac{df_m}{D_m} \overline{\mathbf{M}}_i^{-1} (\Delta Z_m \mathbf{e}_1^T) \mathbf{q}_{Ne_m} = -\overline{\mathbf{M}}_i^{-1} \mathbf{S}_i^* \quad (102)$$

式(102)表明：当 $\varepsilon_g \rightarrow 0$ ， $\overline{\mathbf{M}}_i^{-1} \mathbf{M}_i = \mathbf{I}$ ，求解如下：

$$\mathbf{q}_i = -\overline{\mathbf{M}}_i^{-1} \mathbf{S}_i^* \quad (103)$$

尽管方程组(102)的系数矩阵不再对称，不对原控制方程实施预处理(Demmel, 1997)，仍然可以使用预处理的共轭梯度算法求解。PCG 算法增加的计算量仅包括一个临时数组的额外存储和 $\overline{\mathbf{M}}_i$ 的求逆计算（在每个水体棱柱体内直接对三对角矩阵求逆）。另外，因为 $\overline{\mathbf{M}}_i$ 求逆需要的数据在进程中是连续存储的（仅在水平向上做区域分区），并行化的 PCG 不需要额外的通信同步节点。每个迭代步内计算内积要做 2 次同步，进程间边界单元处的通信与内部单元的 $\mathcal{L}(p_k)$ 的计算同时进行。

数值试验(non-hydrostatic internal seiche)表明：

- ✓ 网格长宽比 $0.04 < \varepsilon_g < 1$ 时，PCG 较 CG 可明显加速收敛；
- ✓ 增大长宽比将降低收敛速度；
- ✓ 对于很大网格长宽比的情况，PCG 不能加速收敛；
- ✓ 实际情况中，长宽比很少能接近 1.0 的，因此要预估非静水压力区域的分布，在此区域应加密网格，如果能 PCG 加速 NH 区域的收敛，就能提高整体计算效率。

6.3 并行计算效率

（1）网格分区和荷载均衡

suntans 模型水平向使用非结构化网格，垂向使用 z 分层，因为在水平向进

行区域分解，能保证在每个进程中，水体棱柱内变量存储连续，提高计算性能。

计算进程之间的网格分区要保持荷载均衡，非结构网格模型的计算效率很大程度上跟相邻计算进程之间的通信量有关，进程间通信直接与进程边界处的虚拟单元(ghost cells)数相关。

suntans 模型使用 ParMETIS 软件(Karypis et al., 1998)进行非结构网格分区。下图中，东北角的分区面积比西南角的要大，因为东北角是浅水区（垂向分层少），西南角是深水区（垂向分层多），这样就保证各分区的计算荷载均衡。（**可见：suntans 的平面网格分区还考虑了 active 垂向分层数**）。

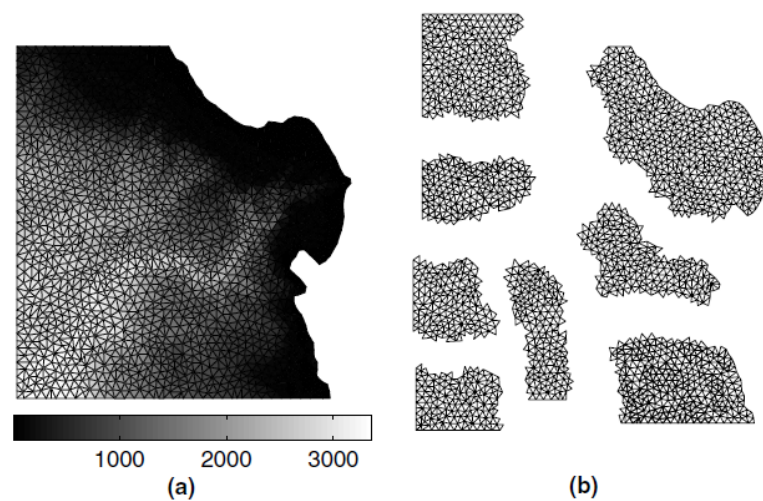


图 Monetary 海湾的非结构网格分区

计算性能还可以通过重新排序（**使用 ParMETIS 的网格单元重新排序子程序**）单元号得到进一步提升，因为在内存中相邻单元的物理距离最小化。内存中单元的物理距离可使用**布尔连接关系矩阵**(boolean connectivity matrix)来可视化。连接关系矩阵的 i 行由列向量包围，对应的单元 i 是相邻的话，即为 1，其他处为 0。Monetary 海湾的分区网格单元的连接关系矩阵在有无重新排序的可视化效果如下图。重新排序可减少每个进程计算时间的 20-30%。

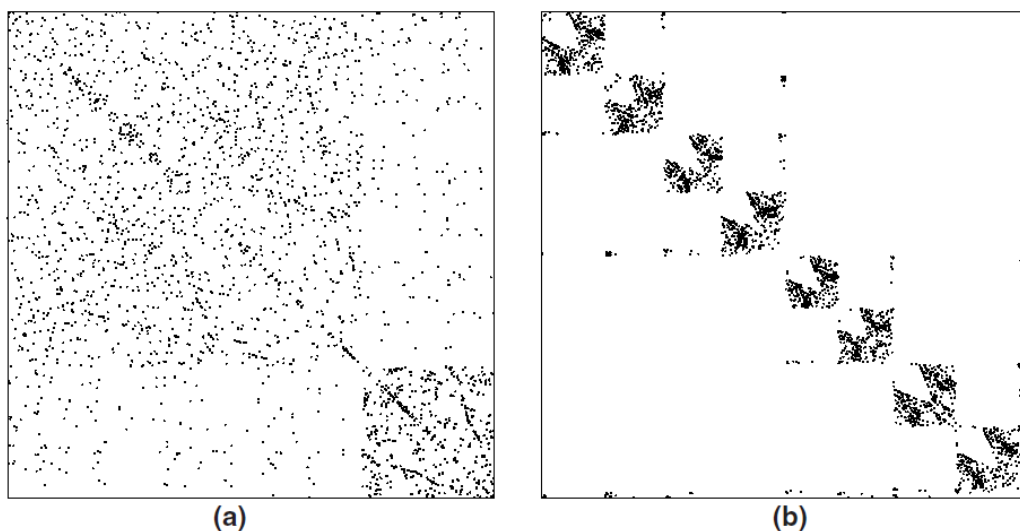


图 连接关系矩阵的可视化((a) 原始的; (b)重新排序)

(2) 并行加速效率

加速比: $S(N_p) = T_{C_1} / T_{C_{N_p}}$

并行效率: $E(N_p) = S(N_p) / N_p$

符合 Amdahl 定律，加速比降随着进程数增加而偏离理想线，因为有一部分代码没有并行化。

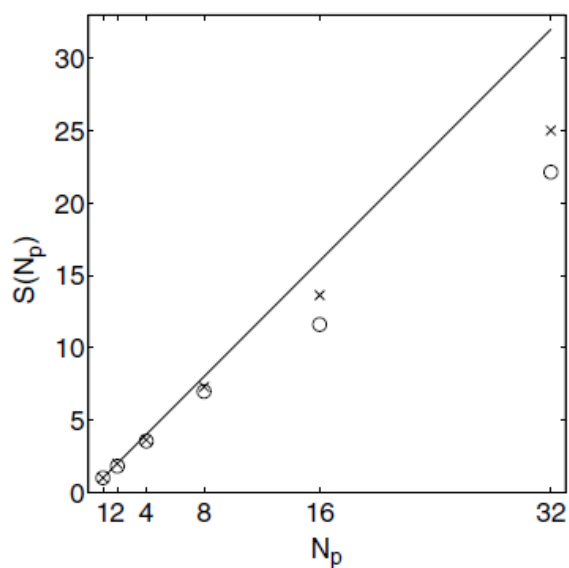


图 21 Monterey 海湾的模拟加速效果（100 万单元 O 和 400 万单元 X）

模拟时间和 wall-clock 时间的比值超过 1 后表明模拟模拟速度比实际物理过程要快。使用 32 个进程(processor)时，100 万单元的并行效率是 0.69，模拟时间

比实际时间快 15.7 倍；而 400 万单元的并行效率是 0.78，模拟时间比实际时间快 3.82 倍。

表 2 加速比和并行效率评价

N_p	1×10^6 cells			4×10^6 cells		
	Speedup	Efficiency	$\Delta t / \Delta t_{\text{wall}}$	Speedup	Efficiency	$\Delta t / \Delta t_{\text{wall}}$
2	1.81	0.91	1.28	1.98	0.99	0.30
4	3.55	0.89	2.52	3.63	0.91	0.56
8	6.98	0.87	4.95	7.29	0.91	1.11
16	11.60	0.73	8.23	13.63	0.85	2.08
32	22.13	0.69	15.70	25.00	0.78	3.82

7 讨论

- ✓ SUNTANS 模型模拟了理想尺度和现实尺度的流体现象，包括：internal seiche, lock exchange 和 Monetary 港湾的重力内波。
- ✓ SUNTANS 模型达到时间二阶精度，这对于模拟内波现象很重要。
- ✓ SUNTANS 模型使用 Eulerian 格式离散动量方程的对流项（而不是 ELM 法），这使得计算时间步长的限制条件更严格，而 SUNTANS 模型的目的就是模拟短时间尺度和小空间尺度的非线性现象，巨大的计算量由 MPI 并行计算加速来平衡。
- ✓ 将来的工作：（1）TVD 格式（保证标量剧烈变化前锋浓度的单调性）；（2）侵入边界法（IBM）表征复杂地形；（3）实施 AMR。