

Genuinely third-order advection scheme for atmospheric flows : the Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm approach

Maciej Waruszewski

Streszczenie

Modelowanie numeryczne jest ważnym, jeśli nie najważniejszym, narzędziem wykorzystywanym w prognozowaniu pogody oraz predykcjach klimatycznych. W modelach pogody, klimatu i transportu zanieczyszczeń adwekcyjny transport powietrza, związków chemicznych lub zanieczyszczeń powinien być opisany z dużą precyzją. Co więcej, schematy adwekcyjne muszą respektować fundamentalne prawa fizyczne, takie jak zachowawczość, monotoniczność i korelacje pomiędzy transportowanymi składnikami.

Własności i błędy numeryczne schematu adwekcyjnego zależą od jego rzędu dokładności. W modelowaniu atmosfery powszechnie stosowane są schematy drugiego rzędu dokładności. Ostatnio daje się jednak zaobserwować trend ku algorytmom wyższego rzędu dokładności (tj. trzeciego lub wyższego). Połączenie wysokiego rzędu dokładności ze stabilnością schematu i respektowaniem praw fizycznych jest nietrywialne.

Niniejsza praca proponuje schemat adwekcyjny trzeciego rzędu dokładności w oparciu o istniejący algorytm MPDATA (Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm). Modele oparte o schemat MPDATA mają bogatą historię zastosowań w geo- i astrofizyce. Standardowy schemat adwekcyjny MPDATA jest drugiego rzędu dokładności, zachowuje znak (opcjonalnie jest nieoscylacyjny) i jest w pełni wielowymiarowy. Warto podkreślić, że w symulacjach przepływów turbulentnych MPDATA może modelować w niejawnym sposób turbulencję podskalową.

Niniejsza praca rozszerza algorytm MPDATA do trzeciego rzędu dokładności dla przepływów zmiennych w czasie lub przestrzeni, jednocześnie utrzymując wszystkie zalety istniejących schematów MPDATA o drugim rzędzie dokładności. Zostało to osiągnięte przez wyprowadzenie wiodącego członu błędu obciążenia standardowego schematu MPDATA drugiego rzędu, przeprowadzenie procedury Cauchy-Kowalewskiej w celu wyrażenia go w formie przestrzennej i kompensacji jego dyskretnej postaci—w sposób bardzo podobny do tego jak standardowy schemat MPDATA poprawia błąd schematu pierwszego rzędu dokładności typu upwind. Procedura wyprowadzenia błędu obciążenia w formie przestrzennej została zautomatyzowana poprzez użycie systemu algebry komputerowej. Pozwala to na uwzględnienie różnych opcji algorytmu MPDATA bezpośrednio w schemacie trzeciego rzędu dokładności, ułatwiając w ten sposób implementacje algorytmu w istniejących kodach komputerowych. W duchu algorytmu MPDATA, błąd jest kompensowany używając schematu typu upwind, co skutkuje otrzymaniem algorytmu zachowującego znak, oraz wymagającym jedynie dwóch iteracji typu upwind. Różne opcje algorytmu MPDATA (takie jak: wersja w uogólnionych zmiennych krzywoliniowych lub opcja nieoscylacyjna) w

sposób prosty mogą być zastosowane w schemacie o pełnym trzecim rzędzie dokładności.

Nowy schemat został zaimplementowany w bibliotece schematów MPDATA z otwartym kodem źródłowym, *libmpdata++*. W pracy przedstawiono główne idee przyświecające stworzeniu biblioteki, szczególnie podkreślając jej zamysł oparty na programowaniu obiektowym oraz użyciu nowoczesnych zasadach inżynierii oprogramowania. Przedyskutowana są zalety takiego zaprojektowania biblioteki dla implementacji schematu o pełnym trzecim rzędzie dokładności.

Specjalnie skonstruowane trójwymiarowe rozwiązanie równania adwekcji jest użyte w celu weryfikacji teoretycznego wyprowadzenia oraz jego numerycznej implementacji. Standardowe testy transportu adwekcyjnego pozwalają na porównanie nowego schematu z innymi popularnymi schematami stosowanymi w meteorologii obliczeniowej. Demonstrują również jego zalety dla modeli transportu zanieczyszczeń używanych do monitorowania, prognozy, i kontroli jakości powietrza.

Zalety schematu MPDATA o pełnym trzecim rzędzie dokładności dla zastosowań w dynamice płynów są zilustrowane poprzez symulacje podwójnej warstwy ścinania, konwekcyjnej warstwy granicznej oraz wyidealizowanej superkomórki burzowej. W symulacjach podwójnej warstwy ścinania przeprowadzona została ilościowa analiza zwiększonej dokładności nowego schematu w modelu, który jako całość ma mniejszy rząd dokładności. Symulacje konwekcyjnej warstwy granicznej pokazują niejawną model turbulencji podskalowej nowego schematu MPDATA. Cechy schematu w symulacjach z parametryzowaną mikrofizyką chmur zostały zbadane w teście wyidealizowanej superkomórki burzowej.

Podsumowując, użycie schematu MPDATA o trzecim rzędzie dokładności poprawiło wyniki symulacji w różnych testowanych przypadkach istotnych w modelowaniu atmosfery. Zalety nowego schematu są szczególnie dobrze widoczne w standardowych testach transportu adwekcyjnego, , zatem używanie go dla rozwiązywania transportu adwekcyjnego może być szczerze rekomendowane. Nowy algorytm MPDATA, lepiej niż jego wersja standardowa, modeluje w niejawną sposób turbulencję podskalową. Skomplikowość nowego schematu nie stanowi dużego problemu dzięki dostępności jego otwartej implementacji.

Genuinely third-order advection scheme for atmospheric flows : the Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm approach

Maciej Waruszewski

Abstract

Numerical modelling of the atmosphere is crucially important for the state-of-the-art weather forecasting and climate prediction. In weather, climate, and chemistry-transport models, advective transport of moist air, chemical species, or pollutants has to be represented with high accuracy. Furthermore, advection schemes need to respect the fundamental physical principles of transport, such as conservation, monotonicity, compatibility with mass continuity, and correlations between tracers.

Numerical errors and behavioural properties of an advection scheme are dependent on its order of accuracy. In atmospheric modelling, second-order accurate schemes are common, and a trend towards high-order (i.e. third-order or higher) accurate algorithms can be observed. However, combining high-order accuracy with robustness and physical realisability is far from trivial.

To achieve high-order accuracy without compromising advantageous numerical properties, this thesis proposes a third-order accurate advection scheme based on the Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm (MPDATA). MPDATA-based solvers have a rich history of successful applications in geo- and astrophysics. The standard MPDATA advection scheme is second-order accurate, sign-preserving (optionally nonoscillatory), and fully multidimensional. Remarkably, in simulations of turbulent flows, MPDATA can provide an implicit subgrid-scale turbulence model.

This thesis extends MPDATA to third-order accuracy for temporally or spatially varying flows, while preserving its beneficial characteristics. This is accomplished by deriving the leading truncation error of the standard second-order MPDATA, performing the Cauchy-Kowalevski procedure to express it in a spatial form and compensating its discrete representation—much in the same way as the standard MPDATA corrects the first-order accurate upwind scheme. The procedure of deriving the spatial form of the truncation error was automated using a computer algebra system. This enables various options in MPDATA to be included straightforwardly in the third-order scheme, thereby minimising the implementation effort in existing code bases. Following the spirit of MPDATA, the error is compensated using the upwind scheme resulting in a sign-preserving algorithm, and the entire scheme can be formulated using only two upwind passes. Established MPDATA enhancements, such as formulation in generalised curvilinear coordinates, the nonoscillatory option or the infinite-gauge variant, carry over to the fully third-order accurate scheme.

The novel scheme was implemented in *libmpdata++*, which is an open-source library of

MPDATA-based solvers. Highlights of the library are presented, particularly stressing its design based on object-oriented programming and modern software development practices. Benefits of the adopted design choices for implementing the fully third-order accurate scheme are discussed.

A manufactured 3D analytic solution is used to verify the theoretical development and its numerical implementation. Global tracer-transport benchmarks facilitate comparison of the fully third-order accurate MPDATA to other schemes popular in computational meteorology, while also demonstrating its benefits for chemistry-transport models fundamental to air quality monitoring, forecasting and control.

Advantages of the fully third-order-accurate MPDATA for fluid dynamics applications are illustrated by simulations of a double shear layer, a convective boundary layer, and an idealised supercell storm. The double shear layer simulations quantify the increased accuracy of the new scheme in an overall lower-order accurate flow solver. Simulations of the convective boundary layer reveal its implicit subgrid-scale turbulence model. Characteristics of the scheme in simulations with parametrised cloud microphysics are explored in the idealised supercell storm benchmark.

Using the genuinely third-order accurate MPDATA consistently improved simulation results in a variety of test cases relevant to atmospheric modelling. The improvement was especially significant for the tracer transport benchmarks; therefore, the novel scheme can be generally recommended for tracer transport applications. In simulations of turbulent flows, the fully third-order accurate MPDATA revealed an implicit subgrid-scale model with beneficial characteristics. An increased complexity of the new scheme is offset by the availability of its open-source implementation.