Supercomputer simulation of nonlinear wave processes in the Earth atmosphere

Sergey Kshevetskii[1]

October 27, 2019

Outline

1. Introduction
   - Regional supercomputer model "AtmoSym" of atmospheric wave processes from the Earth's surface up to the near-space altitude of 500 km. History of its development. Parallel compoutations in "AtmoSym"
   - Analysis of simplified equations for a non-dissipative gas
   - The theory of llinerized hydrodynamic equations has no problems
2. Our Results/Contribution
   - The general wave energy functional for nonlinear equations and proof of necessity of additional (to Lax) condition of physical entropy nonincrease
   - The definition of weak solutions of nonlinear equations
   - Differential-difference approximation
   - Important lemmas and theorem, Lyapunov fuction
3. Supercomputer program "AtmoSym" that realizes the method

Outline

Supercomputer model "AtmoSym" for simulation of atmospheric wave processes

Трехмерная суперкомпьютерная модель нелинейных волновых процессов в атмосфере была создана в начале-2000-х. В ее создании принимали участие ученые БФУ им.И.Канта (Калининград), СпБГУ (Санкт-Петрбург) и Института физики атмосферы РАН (Москва). Постановка задачи совместная. Математический аппарат, программа были построены Кшевецким С.П. (Калининград).

Программа основана на численном решении системы уравнений гидротермодинамики для атмосферного газа. Компиляторы Intel Fortran, PGI Fortran, GNU Fortran. Программа имеет для легкого управления оболочку, написанную на Python. Оболочка построена для диалога с ппрограммой, она конфигурирует программу, компилирует, и отправляет на счет на суперкомпьютер.

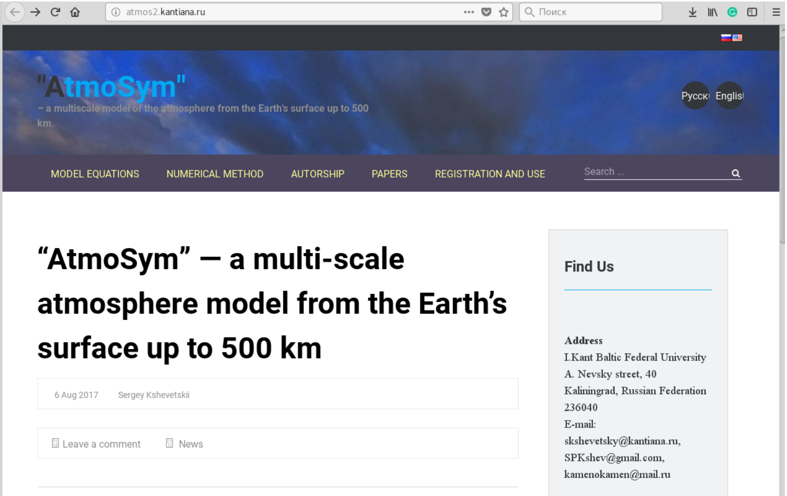
Supercomputer model "AtmoSym" for simulation of atmospheric wave processes

Распараллеливание и оптимизация:

- Распределение вычислений по нодам с помощью MPI.
- На нодах распределение по ядрам с помощью OpenMP.
- Матричные вычисления в ядрах с помощью инструкций SSE. Это происходит, когда все необходимые данные находятся на одной странице памяти и загружаются в кеш процессра целиком. Ускорение вычислений до 10 раз.

Таким образом, распараллеливание вычислений произведено на трех уровнях: по нодам кластера, по ядрам нод, и матричные вычисления в ядрах процессоров.
Код "AtmoSym"также оптимизирован с помощью специальной интеллектуальной программы написанной на Maple для оптимизации. (Это помимо оптимизации компилятором).

"AtmoSym" program in Internet



Primitive equations of the model

Система уравнений термогидродинамики, описывающая процессы в атмосфере. Влажность и заряженная компонента не учитываются. Уравнения решаются до 500 км высоты над территорией с размером несколько тысяч километров.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial \rho u}{\partial x}+\frac{\partial \rho v}{\partial y}+\frac{\partial \rho w}{\partial z}=q_{\rho}(x,y,z,t),$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t}+\frac{\partial \rho u^2}{\partial x}+\frac{\partial \rho u v}{\partial y}+\frac{\partial \rho u w}{\partial z}+2\rho\omega_z v=-\frac{\partial P}{\partial x}+\xi(z)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\xi(z)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\xi(z)\frac{\partial u}{\partial z}\right)+\rho q_u(x,y,z,t),$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t}+\frac{\partial \rho u v}{\partial x}+\frac{\partial \rho v^2}{\partial y}+\frac{\partial \rho v w}{\partial z}-2\rho\omega_z u=-\frac{\partial P}{\partial y}+\xi(z)\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+\xi(z)\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\xi(z)\frac{\partial v}{\partial z}\right)+\rho q_v(x,y,z,t),$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t}+\frac{\partial \rho u w}{\partial x}+\frac{\partial \rho v w}{\partial y}+\frac{\partial \rho w^2}{\partial z}=-\frac{\partial P}{\partial z}-\rho g+\xi(z)\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}+\xi(z)\frac{\partial^2 w}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\xi(z)\frac{\partial w}{\partial z}\right)+\rho q_w(x,y,z,t),$$

$$\frac{1}{\gamma-1}\left(\frac{\partial P}{\partial t}+\frac{\partial P u}{\partial x}+\frac{\partial P v}{\partial y}+\frac{\partial P w}{\partial z}\right)=-P\nabla\vec{v}+\kappa(z)\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\kappa(z)\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa(z)\frac{\partial T}{\partial z}\right)+Q_{visc}+Q(z)+\frac{P}{(\gamma-1)T}q_T(x,y,z,t),$$

$$Q_{visc}=\xi(z)\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2+\left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial w}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2\right],$$

$$Q(z)=-\frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa(z)\frac{\partial T_0(z)}{\partial z}\right).$$

Outline

1. Introduction
   - Regional supercomputer model "AtmoSym" of atmospheric wave processes from the Earth's surface up to the near-space altitude of 500 km. History of its development. Parallel compoutations in "AtmoSym"
   - Analysis of simplified equations for a non-dissipative gas
   - The theory of llinerized hydrodynamic equations has no problems
2. Our Results/Contribution
   - The general wave energy functional for nonlinear equations and proof of necessity of additional (to Lax) condition of physical entropy nonincrease
   - The definition of weak solutions of nonlinear equations
   - Differential-difference approximation
   - Important lemmas and theorem, Lyapunov fuction

Simplified non-dissipative equations

В атмосфере вязкость и теплопроводность пренебрежимо малы до высоты 100 км (исключая узкий слой у поверхности Земли). Поэтому, чтобы построить эффективный численный метод, рассмотрим уравнения для недиссипативнорго газа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial \rho u}{\partial x}+\frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0, \qquad \frac{\partial \rho u}{\partial t}+\frac{\partial \rho u^2}{\partial x}+\frac{\partial \rho uw}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial x}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t}+\frac{\partial \rho uw}{\partial x}+\frac{\partial \rho w^2}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z}-\rho g, \qquad \frac{\partial}{\partial t}(\rho e)+\nabla(\rho e\vec{v})=0.$$

Здесь ρ – плотность; $p=\frac{\rho RT}{\mu}$ – давление; $e=\left(\frac{u^2+w^2}{2}+gz+\frac{c_v T}{\mu}\right)$ – удельная энергия; T – температура, R – универсальная газовая постоянная; c_V – теплоемкость на киломоль; μ – молекулярный вес; u– горизонтальная массовая скорость; w – вертикальная массовая скорость жидкости; t – время; x, z – горизонтальная и вертикальная координаты; g–

The domain, boundary conditions and stratification

Уравнения (1) для двух пространственный измерений. Случай трех измерений аналогичен.

Предполагается, что атмосфера изотермическая, то есть, температура T_0 атмосферы не зависит от высоты. Тогда плотность газа стратифицирована экспоненциально:

$$\rho_0(z) = \rho_{00} \exp\left(-\frac{z}{H}\right), \qquad H = \frac{RT_0}{g\mu}.$$

Реальная атмосфера Земли до высоты 80км близка к изотермической, $H \approx 8$км .

Уравнения рассматриваются в прямоугольной области Ω.

Нижняя граница области Ω находится на поверхности земли.

Граничные условия

$$(\vec{v}, \vec{n}) = 0 \tag{2}$$

на границе $\partial\Omega$ области Ω , где $\vec{v} = (u, w)$ и $\vec{n}$ — нормаль к

The well-known results of mathematical investigation of hydrodynamic equations for an ideal gas

- Во многих случаях гладкое решение уравнений существует только до некоторого момента t_0, зависящего от начальный условий, (Kovalevskaya theorem, 1874).
- Чтобы применять уравнения для всех t, Лакс предложил в 1955 г. идею слабого решения - это решение некоторых интегральных уравнений, получаемых из исходных дифференциальных уравнений.
- Лакс показал, что слабое решение неединственно.
- Чтобы выделить решение, имеющее физический смысл, Лакс предложил использовать фундаментальные законы сохранения массы, импульса, энергии.
- Важные теоремы единственности, устойчивости и существования решения при всех t не доказаны в 3D случае до сих пор.

Modern ideas concerning of gas dynamic equations

- Лакс преположил, что какие-то дополнительные условия могут быть иногда необходимы (зависит от ситуации) для единственности и устойчивости.
- Самое популярное дополнительно условие часто называется энтропийным принципом и имеет несколько различных формулировок; наиболее общая формулировка называется TVD (total variation diminish).
- Существует много различных TVD-схем.

Проблемы сегодняшнегго дня:

1. Энтропийный принцип не имеет отношения к физической энтропии. Как насчет физической энтропии?
2. Единственность и устойчивость все равно не доказаны.

Outline

1. Introduction
   - Regional supercomputer model "AtmoSym" of atmospheric wave processes from the Earth's surface up to the near-space altitude of 500 km. History of its development. Parallel compoutations in "AtmoSym"
   - Analysis of simplified equations for a non-dissipative gas
   - The theory of llinerized hydrodynamic equations has no problems
2. Our Results/Contribution
   - The general wave energy functional for nonlinear equations and proof of necessity of additional (to Lax) condition of physical entropy nonincrease
   - The definition of weak solutions of nonlinear equations
   - Differential-difference approximation
   - Important lemmas and theorem, Lyapunov fuction

The linearized system of gas dynamic equations

В теории линеаризованных уравнений нет проблем. Вследствие большой плотности газа у поверхности Земли, амплитуда волн у поверхности обычно мала, и часто оправдано использование линеаризованных уравнений:

$$
\begin{aligned}
(\rho_0\Psi)_t + (\rho_0 u)_x + (\rho_0 u)_z &= 0, \\
(\rho_0 u)_t + \rho_0 g H(\Psi+\Phi)_x &= 0, \\
(\rho_0 w)_t + (\rho_0 g H(\Psi+\Phi))_z + \rho_0 g \Psi &= 0, \\
(\rho_0\Phi)_t + (\gamma-1)((\rho_0 u)_x + (\rho_0 w)_z) + \frac{\alpha}{H}\rho_0 w &= 0,
\end{aligned}
\qquad (3)
$$

Здесь $\Psi = \frac{\rho(x,z,t)-\rho_0(z)}{\rho_0(z)}$, $\Phi = \frac{T(x,z,t)-T_0(z)}{T_0(z)}$, $\alpha = \left(\gamma - 1 + \gamma\frac{dH(z)}{dz}\right)$.

Уравнения (3), кроме волновых, имеет стационарные решения, которые можно отождествить с ветром. Мы предполагаем отсутствие ветра.

The wave energy functional and correctnes of the small-amplitude problem

Линеаризованные уравнения (3) обладают квадратичнвм законом сохранения волновой энергии $\frac{dH_{lin}}{dt} = 0$,

$$H_{lin} = \int_{\Omega} \rho_0(z) \left[\frac{u^2 + w^2}{2} + \frac{gH}{2\gamma}(\Phi + \Psi)^2 + \frac{gH}{2\gamma\alpha}(\Phi - (\gamma - 1)\Psi)^2 \right] d\Omega. \quad (4)$$

В (4) слагаемое, содержащие скорости, имеет смысл кинетической энергии. Пусть $X = \begin{pmatrix} \Psi \\ u \\ w \\ \Phi \end{pmatrix}$. Конструкция $\| X \| = \sqrt{2H_{lin}(X)}$ удовлетворяет аксиомам нормы. Таким образом, из сохранения волновой энергии (4) вытекает $\frac{d\|X\|}{dt} = 0$ устойчивость и единственность решения.

Outline

1. Introduction
   - Regional supercomputer model "AtmoSym" of atmospheric wave processes from the Earth's surface up to the near-space altitude of 500 km. History of its development. Parallel compoutations in "AtmoSym"
   - Analysis of simplified equations for a non-dissipative gas
   - The theory of llinerized hydrodynamic equations has no problems
2. Our Results/Contribution
   - The general wave energy functional for nonlinear equations and proof of necessity of additional (to Lax) condition of physical entropy nonincrease
   - The definition of weak solutions of nonlinear equations
   - Differential-difference approximation
   - Important lemmas and theorem, Lyapunov fuction

The general wave energy functional for nonlinear equations

Можно ли построить какой-то аналогичный обобщающий функционал для нелинейных уравнений?

Theorem

Пусть решение уравнений (1) гладкое. Тогда функционал

$$H_{nonl} = \int\limits_{\Omega} \left[\frac{1}{2}\rho \vec{v}^{\,2} + \rho g z + \frac{c_V \rho T}{\mu} - \frac{c_V \rho T_0}{\mu} \left(\gamma + \ln \frac{T}{T_0} - (\gamma - 1) \ln \frac{\rho}{\rho_0(0)} \right) + \frac{c_V \rho_0(z) T_0}{\mu} (\gamma - 1) \right] dx\, dz,$$

сохраняется на решениях. Подынтегральное выражение в (5) неотрицательное при $\rho \geq 0$. В пределе волн малых амплитуд функционал (5) переходит в функционал (4)

Expansion to the case of non-smooth solutions

Обобщим (5) на случай негладких решений

- Из физического смысла потребуем сохранения функционалов массы, гидродинамической энергии.
- Функционал энтропии $\int\limits_{\Omega} \frac{c_V \rho}{\mu} \left(\ln T - (\gamma - 1) \ln \rho \right) \, d\Omega$ может не сохраняться. Постулируем

$$\frac{dH_{nonl}}{dt} \leq 0. \qquad (6)$$

  Знак "$\leq$" выбран потому, что знак "$>$" в (6) означает неустойчивость.

1. (6) является необходимым условием существования, единственности и устойчивости решений
2. Мы видим, что неубывание (физической!) энтропии является необходимым дополнительным (to Lax) условием существования, единственности, устойчивости решений

Outline

Weak solutions, preliminary consideration

Поскольку сохранение энергии и массы постулировано, из (6) для энтропии $s = \frac{c_V}{\mu}(\ln(T)\text{-}(\gamma - 1)\ln(\rho))$ следует

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho s) + \nabla(\rho s \vec{v}) = \nu, \qquad \nu \geq 0. \tag{7}$$

ν отлично от нуля только в точках, где отсутствуют производные. Принцип минимума производства энтропии Пригожина подсказывают, что ν должно определяться из требования минимальности $|\nu|$, при условии $\nu \geq 0$.

Comparizon with Lax definition of a weak solution

- Мы накладываем дополнительное условие невозрастания энтропии. То есть, мы работаем с перерпределенной системой (число уравнений + неравенство больше числа неизвестных функций)
- Еще одно условие - минимальное производство энтропии.

Неубывание энтропии важно для существования, единственности и устойчивости решения.
Минимальный рост этропии - чисто физическое требование.
Если уж обеспечиваем неубывание энтропии, то нужно делать это в соответствии с реальными физическими законами.

Outline

1. Introduction
   - Regional supercomputer model "AtmoSym" of atmospheric wave processes from the Earth's surface up to the near-space altitude of 500 km. History of its development. Parallel compoutations in "AtmoSym"
   - Analysis of simplified equations for a non-dissipative gas
   - The theory of llinerized hydrodynamic equations has no problems
2. Our Results/Contribution
   - The general wave energy functional for nonlinear equations and proof of necessity of additional (to Lax) condition of physical entropy nonincrease
   - The definition of weak solutions of nonlinear equations
   - Differential-difference approximation
   - Important lemmas and theorem, Lyapunov fuction

Difference grid

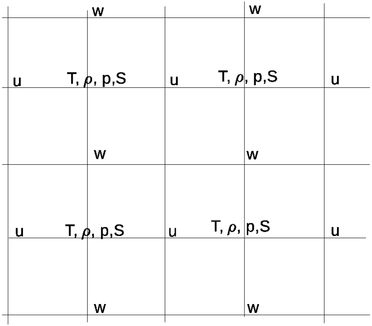


Рис.: 2. Разнесенная сетка «крест» для численного решения уравнений. T, ρ, p, s определены , в узлах с четными индексами i, k ; u определена между узлами сетки с (T, ρ, p, s), в узлах с нечетным i; w определена между узлами с (T, ρ, p, s), в узлах с нечетным k. В остальных, нечетных узлах значения вычисляются с помощью специальных интерполяций, и обозначаются $\tilde{T}, \tilde{\rho}, \tilde{s}$ соответственно.

Differenrial-difference approximation

Операторы дифференцирования по координатам в (1) заменим конечно–разностными аппроксимациями второго порядка точности по схеме "крест". В результате получим конечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Уравнение неразрывности аппроксимируем на шаблоне Рис. 2 по следующей схеме

$$\frac{d}{dt}\rho_{i,k} + \frac{\tilde{\rho}_{i+1,k}\, u_{i+1,k} - \tilde{\rho}_{i-1,k}\, u_{i-1,k}}{2h} + \frac{\tilde{\rho}_{i,k+1}\, w_{i,k+1} - \tilde{\rho}_{i,k-1} w_{i,k-1}}{2h} = 0,$$

Здесь i, k – четные целые числа, и $\rho_{i,k}$ определена в узлах с четными номерами.

Differenrial-difference approximation

Дифференциально-разностное уравнение для скорости u:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho_{i,k}+\rho_{i+2,k}}{2}\,u_{i+1,k}\right)+\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\tilde{\rho}_{i+3,k}\,u^2_{i+3,k}-\tilde{\rho}_{i-1,k}\,u^2_{i-1,k}}{4h}\right)+u_{i+1k}\,\tilde{\rho}_{i+\right.$$

$$+\,\tilde{\rho}_{i+1,k}\,u_{i+1,k}\,\frac{u_{i+3,k}-u_{i-1,k}}{4h}+ \qquad (9)$$

$$\left(\frac{\tilde{\rho}_{i,k+1}w_{i,k+1}-\tilde{\rho}_{i,k-1}w_{i,k-1}}{2h}+\frac{\tilde{\rho}_{i+2,k+3}w_{i+2,k+1}-\tilde{\rho}_{i+2,k-1}w_{i+2,k-1}}{2h}\right)u_{i-}$$

$$+\frac{1}{4}\left[\frac{u_{i+1,k+2}-u_{i+1,k}}{2h}\left(\tilde{\rho}_{i,k+1}w_{i,k+1}+\tilde{\rho}_{i+2,k+1}w_{i+2,k+1}\right)+\right.$$

$$\left.\frac{u_{i+1,k}-u_{i+1,k-2}}{2h}\left(\tilde{\rho}_{i,k-1}w_{i,k-1}+\tilde{\rho}_{i+2,k-1}w_{i+2,k-1}\right)\right]+\frac{p_{i+2,k}-p_{i,k}}{2h}=0,$$

Здесь номера i, k – четные целые числа.

Does such a weak solution exist?

Дифференциально- разностное уравнение для скорости w:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho_{i,k}+\rho_{i,k+2}}{2}w_{i,k+1}\right)+\frac{1}{2}\left[\frac{\tilde\rho_{i,k+3}w^2_{i,k+3}-\tilde\rho_{i,k-1}wu^2_{i,k-1}}{4h}+w_{i+1,k}\frac{\tilde\rho_{i,k}}{}\right.$$

$$+\tilde\rho_{i+1,k}w_{i,k+1}\frac{w_{i,k+3}-w_{i,k-1}}{4h}+$$

$$\left(\frac{\tilde\rho_{i+1,k+2}u_{i+1,k+2}-\tilde\rho_{i-1,k+2}u_{i-1,k+2}}{2h}+\frac{\tilde\rho_{i+1,k}u_{i+1,k}-\tilde\rho_{i-1,k}u_{i-1i,k}}{2h}\right)w_{i,k}$$

$$+\frac{1}{4}\left[\frac{w_{i+2,k+1}-w_{i,k+1}}{2h}\left(\tilde\rho_{i+1,k+2}u_{i+1,k+2}+\tilde\rho_{i+1,k}u_{i+1,k}\right)+\right.$$

$$\left.\frac{w_{i,k+1}-w_{i-2,k+1}}{2h}\left(\tilde\rho_{i-1,k+2}u_{i-1,k+2}+\tilde\rho_{i-1,k}u_{i-1,k}\right)\right]+\frac{p_{i,k+2}-p_{i,k}}{2h}+\left(\rho_{i}\right.$$

Здесь номера i, k – четные целые числа.

Does such a weak solution exist? Consideration of the enropy relation

Чтобы обеспечить правильное поведение энтропии s, стартуем с консервативного уравнения для энтропии

$$\frac{d}{dt}\rho_{i,k}s_{i,k}+\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\rho}_{i+1,k}\tilde{s}_{i+1,k}u_{i+1,k}-\tilde{\rho}_{i-1,k}\tilde{s}_{i-1,k}u_{i-1,k}}{2h}+\frac{\tilde{\rho}_{i+1,k}\tilde{s}_{i+1,k}u_{i+1,k}\right.$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{\rho}_{i,k+1}\tilde{s}_{i,k+1}w_{i,k+1}-\tilde{\rho}_{i,k-1}\tilde{s}_{i,k-1}w_{i,k-1}}{2h}+\frac{\tilde{\rho}_{i,k+1}\tilde{s}_{i,k+1}w_{i,k+1}-\tilde{\rho}_{i,k-1}\tilde{s}}{2h}\right.$$

$$(\gamma-1)\left(\frac{\delta^h_{i+1,k}u_{i+1,k}-\delta^h_{i-1,k}u_{i-1,k}}{2h}+\frac{\delta^v_{i,k+1}w_{i,k+1}-\delta^v_{i,k-1}w_{i,k-1}}{2h}\right)=0, \tag{10}$$

Здесь в (10) i, k – четные целые числа, и $s_{i,k}$ определана только в узлах с четными i, k. Величина s, энтропия, сохраняется.

Consideration of the enropy relation

(10) преобразуется к более удобному эквивалентному виду

$$\rho_{i,k}\frac{d}{dt}s_{i,k}+\alpha^h_{i,k}\tilde{\rho}_{i+1,k}u_{i+1,k}\frac{s_{i+2,k}-s_{i.k}}{2h}+\beta^h_{i,k}\tilde{\rho}_{i-1,k}u_{i-1,k}\frac{s_{i,k}-s_{i-2,k}}{2h}$$
$$+\alpha^v_{i,k}\rho_{i,k+1}w_{i,k+1}\frac{s_{i,k+2}-s_{i.k}}{2h}+\beta^v_{i,k}\rho_{i,k-1}w_{i,k-1}\frac{s_{i,k}-s_{i.k-2}}{2h} \quad (11)$$
$$+(\gamma-1)\left(\frac{\delta^h_{i+1,k}u_{i+1,k}-\delta^h_{i-1,k}u_{i-1,k}}{2h}+\frac{\delta^v_{i,k+1}w_{i,k+1}-\delta^v_{i,k-1}w_{i,k-1}}{2h}\right)=0$$

Подставим в правую часть уравнения (11) выражение для энтропии

$$s_{i,k}=\frac{c_v}{\mu}\left(\ln\left(T_{i,k}\right)-(\gamma-1)\ln\left(\rho_{i,k}\right)+const\right). \qquad (12)$$

Does such a weak solution exist? Consideration of the enropy relation

Неубывание энтропии гарантируется неравенствами

$$2\,\frac{b-a}{b+a} \le [\ln(b) - \ln(a)] \le \frac{b-a}{2ba}(b+a) \tag{13}$$

применяемыми к $(\ln(\rho_{i+2,k}) - \ln(\rho_{i,k}))$, $(\ln(T_{i,k}) - \ln(T_{i-2,k}))$, и аналочичным выражениям. Свойства

$$\ln(b) - \ln(a) = 2\,\frac{b-a}{b+a} + O(b-a)^3,$$

$$\ln(b) - \ln(a) = \frac{b-a}{2ba}(b+a) + O(b-a)^3 \tag{14}$$

(14) с высокой точностью обеспечивают сохранение энтропии на гладких решениях, и малость роста энтропии. (Согласно принципу минимального производства энропии Пригожина, рост энтропии должен быть минимальным.)

Consideration of the equation for energy

Затем подставим все выражения в выражение для энергии и потребуем ее сохранения. Получим в итоге для давления P:

$$\frac{dP_{i,k}}{dt}+\frac{P_{i,k}}{\rho_{i,k}}\left[(\gamma-1)\left(\frac{\delta_{i+1,k}u_{i+1,k}-\delta_{i-1,k}u_{i-1,k}}{2h}\right)\right.$$

$$+\frac{\gamma}{2h}\left(\left(\tilde{\rho}_{i+1,k}\,u_{i+1,k}-\tilde{\rho}_{i-1,k}\,u_{i-1,k}\right)+\left(\tilde{\rho}_{i,k+1}\,w_{i,k+1}-\tilde{\rho}_{i,k-1}\,u_{i,k-1}\right)\right) \qquad +$$

$$+\frac{1}{2h}\left(\left(\frac{T_{i+2,k}-T_{i,k}}{\tilde{T}_{i+1,k}}-(\gamma-1)\frac{\rho_{i+2,k}-\rho_{ik}}{\tilde{\rho}_{i+1,k}}\right)\alpha^h_{i,k}\tilde{\rho}_{i+1,k}u_{i+1,k}\right.$$

$$\left.+\left(\frac{T_{i,k}-T_{i-2,k}}{\tilde{T}_{i-1,k}}-(\gamma-1)\frac{\rho_{i,k}-\rho_{i-2,k}}{\tilde{\rho}_{i-1,k}}\right)\beta^h_{i,k}\tilde{\rho}_{i-1,k}u_{i-1,k}\right)$$

$$+(\gamma-1)\left(\frac{\delta_{i,k+1}u_{i,k+1}-\delta_{i,k-1}u_{i,k-1}}{2h}\right)+\frac{1}{2h}\left(\left(\frac{T_{i,k+2}-T_{i,k}}{\tilde{T}_{i,k+1}}-(\gamma-1)\frac{\rho_{i}}{}\right.\right.$$

Formulas for factors following energy conservation

$$\alpha^h_{i,k} = \frac{1}{2} sign((T_{i+2,k} - T_{i,k})\, u_{i+1,k}) + \frac{T_{i+2,k}\, sign(-(T_{i+2,k} - T_{i,k})\, u_{i+1,k})}{(T_{i+2,k} + T_{i,k})} \quad (16)$$

$$\beta^h_{i,k} = \frac{1}{2} sign((T_{i,k} - T_{i-2,k})\, u_{i-1,k}) + \frac{T_{i-2,k}\, sign(-(T_{i,k} - T_{i-2,k})\, u_{i-1,k})}{(T_{i-2,k} + T_{i,k})}$$

$$\alpha^v_{\mathrm{i,k}} = \frac{1}{2} sign((T_{i,k+2} - T_{i,k})\, w_{i,k+1}) + \frac{T_{i,k+2}\, sign(-(T_{i,k+2} - T_{i,k})\, w_{i,k+1})}{(T_{i,k+2} + T_{i,k})}$$

$$\beta^v_{\mathrm{i,k}} = \frac{1}{2} sign((T_{i,k} - T_{i,k-1})\, w_{i,k-1}) + \frac{T_{i,k-2}\, sign(-(T_{i,k} - T_{i,k-2})\, w_{i,k-1})}{(T_{i,k-2} + T_{i,k})}$$

$$\delta^h_{i,k} = \left(-1 + \frac{(\rho_{i+2,k} - \rho_{i,k})\, \alpha^h_{i,k}}{\tilde{\rho}_{i+1,k}}\right) \tilde{\rho}_{i+1,k} + \rho_{i,k}, \qquad \varepsilon^h_{i,k} = \left(-1 + \frac{(\rho_{i-2,k} - \dots}{\tilde{\rho}_{i \dots}}\right.$$

$$\delta^v \dots = \left(-1 + \frac{(\rho_{i,k+2} - \rho_{i,k})\, \alpha^v_{i,k}}{\dots}\right) \dots \left(-1 + \frac{(\rho_{i,k-2} - \dots}{\dots}\right.$$

Outline

1. Introduction
   - Regional supercomputer model "AtmoSym" of atmospheric wave processes from the Earth's surface up to the near-space altitude of 500 km. History of its development. Parallel compoutations in "AtmoSym"
   - Analysis of simplified equations for a non-dissipative gas
   - The theory of llinerized hydrodynamic equations has no problems
2. Our Results/Contribution
   - The general wave energy functional for nonlinear equations and proof of necessity of additional (to Lax) condition of physical entropy nonincrease
   - The definition of weak solutions of nonlinear equations
   - Differential-difference approximation
   - Important lemmas and theorem, Lyapunov fuction

Main lemmas

Уравнения (8), (9), (15) образуют замкнутую систему. Для решения (8), (9), (15) с граничными условиями (2) справедливы утверждения:

Lemma

Если $\rho_{i,k}(0) > 0$ *при всех четных* i, k*, то* $\rho_{i,k}(t) > 0$.

Lemma

Если $T_{i,k}(0) > 0$ *при всех четных* i, k*, то* $T_{i,k}(t) > 0$.

Ниже $\sum\limits_{\Omega} A_{i,k}$ – сумма по всем внутренним точкам области Ω, исключая граничные, и где i, k – четные. Тогда:

Important lemmas

Lemma

Выполняется сеточный аналог закона сохранения массы:

$$\frac{d}{dt}\left(4h^2\sum_{\Omega}\rho_{i,k}\right)=0. \tag{17}$$

Lemma

При $g=0$ выполняется сеточный аналог закона сохранения импульса:

$$\frac{d}{dt}\left(4h^2\sum_{\Omega}\frac{\rho_{i,k}+\rho_{i+2,k}}{2}u_{i+1,k}\right)=0, \qquad \frac{d}{dt}\left(4h^2\sum_{\Omega}\frac{\rho_{i,k+2}+\rho_{i,k}}{2}w_{i,k+1}\right) \tag{18}$$

Important lemmas

Lemma

Выполняется сеточный аналог закона сохранения энергии

$$\frac{d}{dt}\left(4h^2\left(\sum_{\Omega}\frac{\rho_{i+2,k}+\rho_{i,k}}{2}\left(u_{i+1,k}\right)^2+\sum_{\Omega}\frac{\rho_{i,k+2}+\rho_{i,k}}{2}\left(w_{i,k+1}\right)^2+\sum_{\Omega}\rho_{i,k}\,g\right.\right.\tag{20}$$

Lemma

Выполняется закон неубывания энтропии

$$\frac{d}{dt}\left[4h^2\sum_{\Omega}\frac{c_v}{\mu}\rho_{i,k}\left(ln\left(T_{i,k}\right)-(\gamma-1)\,ln\left(\rho_{i,k}\right)\right)\right]\geq 0.\tag{21}$$

Important lemma

Lemma

На гладких решениях энтропия приближенно сохраняется:

$$\frac{d}{dt}\left[4h^2\sum\frac{c_v}{\mu}\rho_{i,k}\left(ln\left(T_{i,k}\right)-\left(\gamma-1\right)ln\left(\rho_{i,k}\right)\right)\right]=O\left(h^2\right). \tag{22}$$

Important theorem, Lyapunov function for the system considered

Theorem

Решение задачи (8), (9), (2) существует при $\rho_{i,k}(t=0)>0$, $T_{i,k}(t=0)>0$, $\tilde{H}_{nonl}(t=0)<\infty$. *Справедливо* $\frac{d\tilde{H}_{nonl}}{dt}\leq 0$, *где*

$$\tilde{H}_{nonl}=4h^2\left(\sum_{\Omega}\frac{\rho_{i,k}+\rho_{i+2,k}}{2}\frac{u_{i+1,k}^2}{2}+\sum_{\Omega}\frac{\rho_{i,k}+\rho_{i,k+2}}{2}\frac{w_{i,k+1}^2}{2}+\sum_{\Omega}g\rho_{i,k}z_k\right)$$

$$4h^2\frac{c_V}{\mu}\left(\sum_{\Omega}\rho_{i,k}T_{i,k}-\sum_{\Omega}\rho_{i,k}T_0\left(\gamma-\ln\left(\frac{T_{i,k}}{T_0}\right)-(\gamma-1)\ln\left(\frac{\rho_{i,k}}{\rho_0(0)}\right)\right)+\right.$$

$$\left.\sum_{\Omega}\rho_0(z_k)T_0(\gamma-1)\right)\geq 0. \qquad (23)$$

The constructed functional is a Lyapunov function

В (23) суммы по внутренним четным узлам сетки Рис.2, i, k – четные.
$\tilde{H}_{nonl}$ — дискретный аналог волновой энергии H_{nonl}.
Все выражения под знаками сумм в (23) неотрицательны.

Remark

Функция H_{nonl} в (23) является функцией Ляпунова для системы уравнений (8), (9), (15), в которой значения на границе $\partial\Omega$ области Ω заданы условиями (2). Метод исследования устойчивости систем дифееренципальных уравнений на основе функций Ляпунова широко известен.

The supercomputer "AtmoSym" program realizes the method and now is avalable via Internet

Суперкомпьютерная программа "AtmoSym"реализует обобщение на трехмерный случай. "AtmoSym"учитывает диссипативные эффекты и вращение Земли. Предназначена для расчета атмосферных процессов до высоты 500 км и над территориями с размером до нескольких тысяч километров Предусмотрена возможность решения широкого круга задач: начальных и с источниками волн. Источник может быть задан на границе и задача может быть смешанной. "AtmoSym"предназначена для суперкомпьютеров с рапределенной памятью (кластеров). Обмен между нодами кластера с помощью MPI, на каждой ноде распараллеливание с помощью OPENMP. Вычисления также автоматически параллелятся в ядрах процессоров, с помощью SSEx.

The most interesting. The program is developed and programmed by specially developed computer robot.

Доказательства лемм и теорем - очень грамоздкие и выполнены разработанной программой в Maple. Схема такова.

- Консервативная аппроксимация пространственных производных в уравнении неразрывности
- Консервативная аппроксимация пространственных производных в законе сохранения импульса
- Консервативная аппроксимация постранственных производных в уравнении для энтропии
- Аппроксимация разностей логарифмов, приводящая к неубыванию энтропии
- Все уравнения подставляются в уравнение для энергии и требуется ее сохранение, вычисляются регулирующие параметры.

The most interesting. The program is developed and programmed by specially developed computer robot.

Выведенные нелинейные дифференциально-разносные уравнения решаются с помощью явно-неявной численной схемы. Аппроксимация такова

$$\frac{\chi^{j+\frac{1}{2}} - \chi^{j}}{\tau} = \hat{N}\chi^{j+\frac{1}{2}}, \qquad \frac{\chi^{j+1} - \chi^{j}}{\tau} = \hat{N}\chi^{j+\frac{1}{2}} \tag{24}$$

Здесь $\chi = \begin{pmatrix} \rho_{klm} \\ u_{klm} \\ v_{klm} \\ w_{klm} \\ T_{klm} \end{pmatrix}$ – столбец из искомых функций, решение задачи; j, $j^{1+\frac{1}{2}}$ – - по сути время, τ – шаг по времени.

The most interesting. The program is developed and programmed by specially developed computer robot.

Основные трудности - в решении неявного нелинейного уравнения

$$\frac{\chi^{j+\frac{1}{2}} - \chi^{j}}{\tau} = \hat{N}\chi^{j+\frac{1}{2}}.$$

Для его решения, с помощью Maple, разработана итерационная процедура. Процесс решения сводится к трехточечным уравнениям. Они построены роботом так, чтобы радиус сходимости процедур и скорость сходимости были максимальными. Итерационные процедуры строятся автоматически.