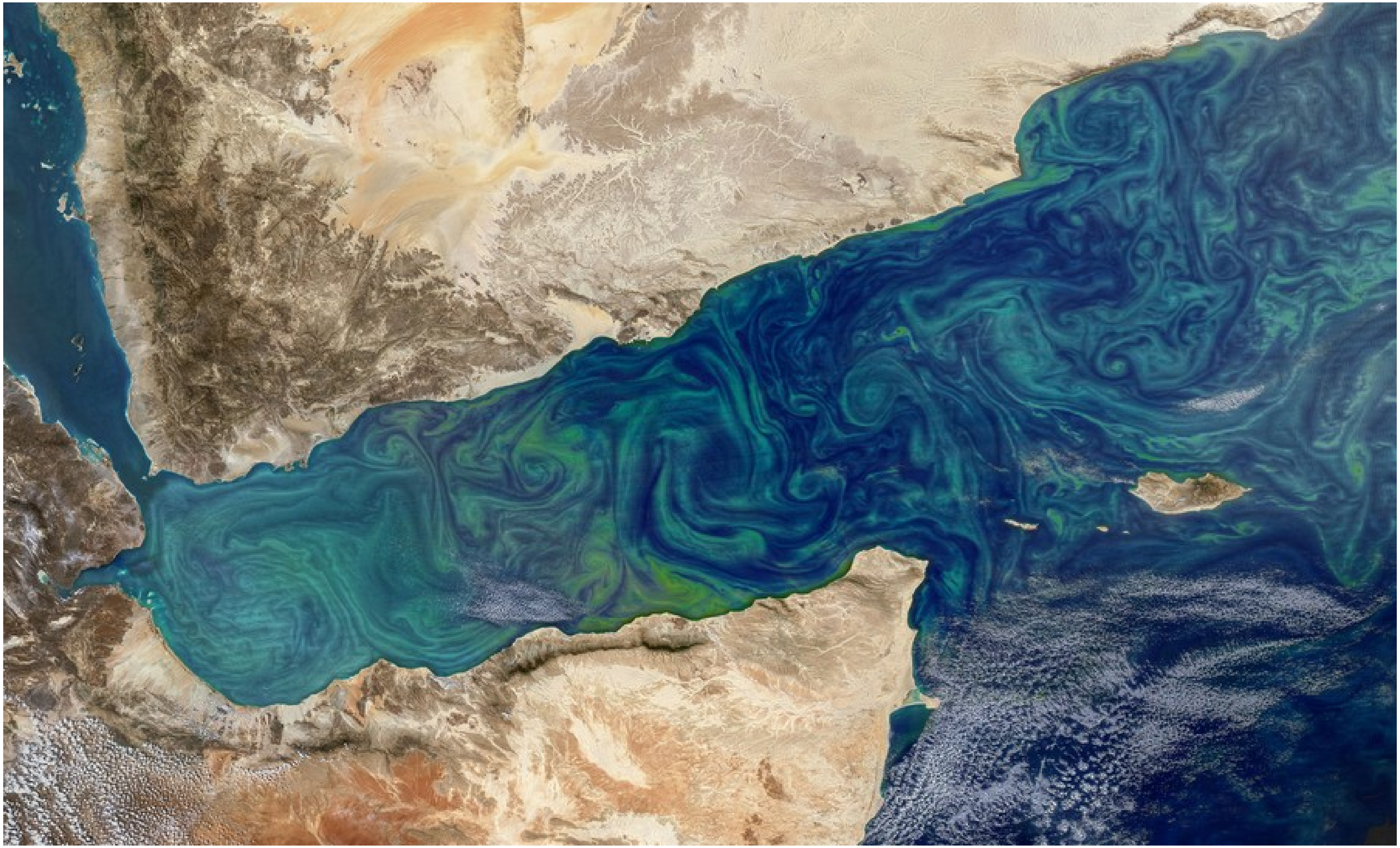
Transport et mélange de traceurs



[credit NASA]

Quelle équation ?

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\nabla} q = 0$$

Forme advective

- Approche **différences finies**
- q discrétisé = valeur au centre de la maille

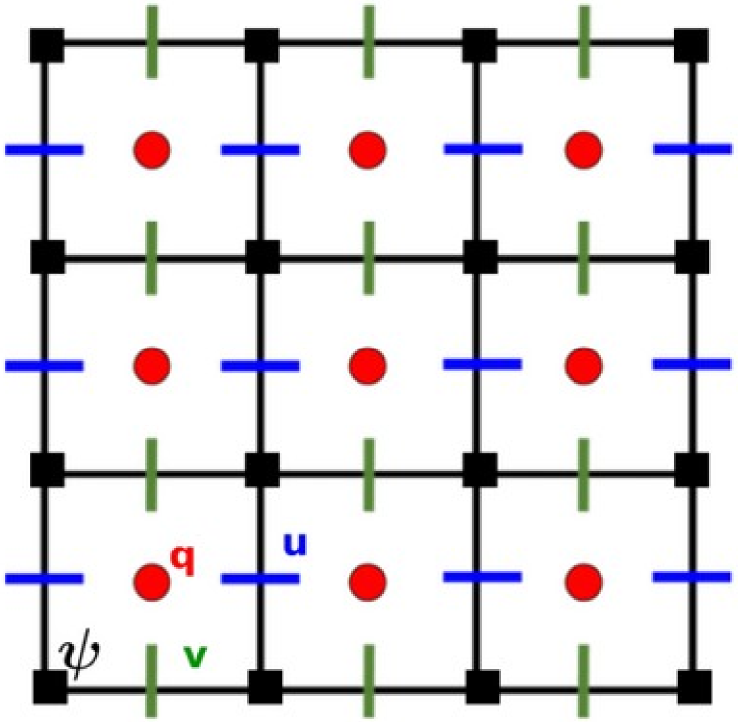
$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\mathbf{U} Q) = 0$$

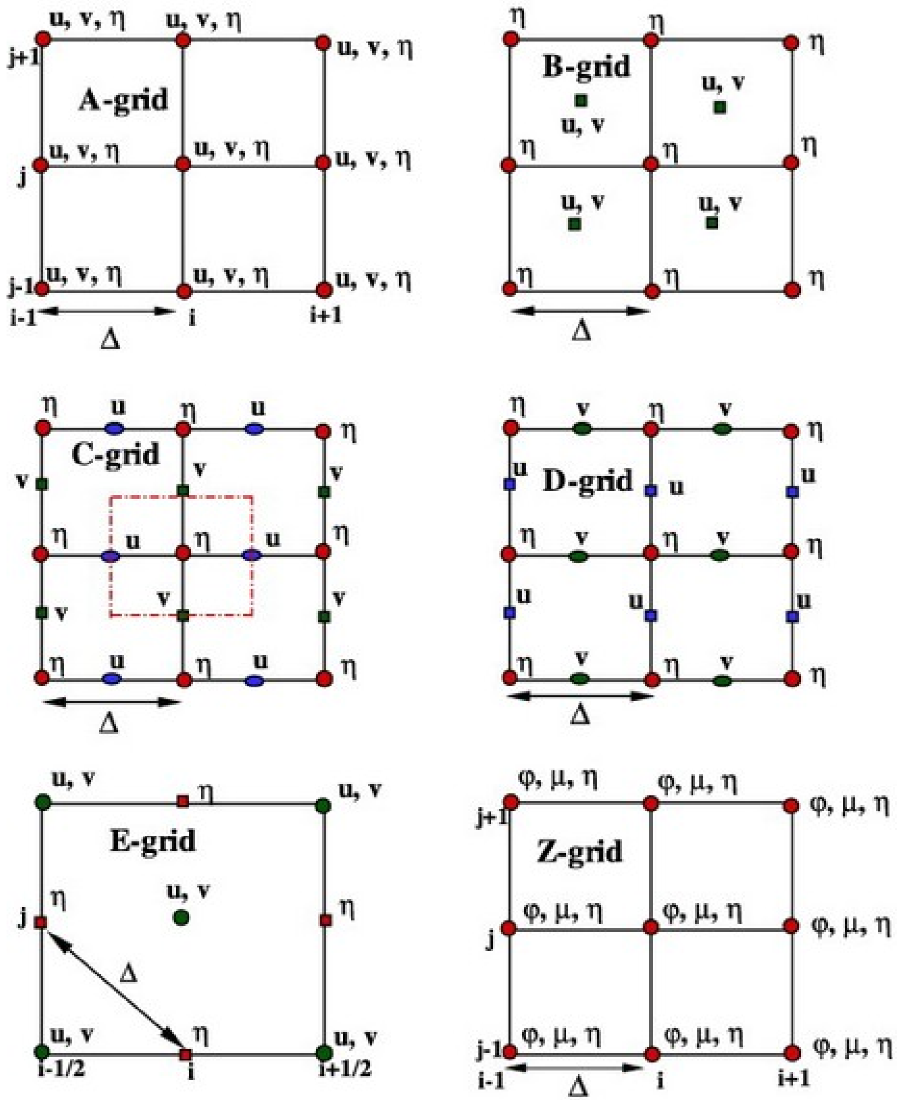
Forme flux

- Approche **volumes finies**
- q discrétisé = valeur moyenne dans la maille
- Facile de construire la conservation globale de q

Grilles décalées

Grille dite “C” [nomenclature Arakawa]





Mailles, centres,
bords x, bords y

La vitesse est naturellement discrétisée sur les bords

Discrétisation de la forme flux

- Dans chaque maille, q evolue sous l'action des flux échangés aux bords

$$\partial_t q = -\frac{1}{\Delta x}(F^x_{i+1/2,j} - F^x_{i-1/2,j} + F^y_{i,j+1/2} - F^y_{i,j-1/2})$$

- On distingue schéma en temps vs schéma en espace
- En espace: tout se ramène à un **calcul de flux**
- En grille décalée, le calcul du flux sur les bords se ramène à un **problème d'interpolation**

cf. schémas au tableau

Interpolation

- On veut des interpolations locales = qui n'utilisent que les valeurs voisines
- Le "stencil" est l'ensemble des points x_i utilisés pour reconstruire en $x_{i+1/2}$
- Interpolation polynomiale
  - Polynômes de Lagrange → pour différences finies
  - Polynômes de Legendre → pour volumes finis
- Un point : interpolation nearest
- Deux points : interpolation linéaire
- Trois points : interpolation parabolique
- Etc.

Ordre des schémas et erreurs associées

- L'ordre du schéma est la taille du stencil (3 points → 3e ordre)
- Les schémas d'ordre pairs sont symétriques (par rapport à i+1/2). Leur **erreur principale** induit des **effets dispersifs**
- Les schémas d'ordre impairs obligent à biaiser l'interpolation à gauche ou à droite. Le bon choix: upwind (là d'où vient l'information). Leur **erreur principale** induit des **effets diffusifs.**

$$\boxed{\omega = u\,k}\boxed{-\,i\,\epsilon(i\,k)^{order+1}}$$

Relation de dispersion de l'équation de transport

1er ordre

$$\omega = u\,k + i\,\epsilon\,k^2$$

2eme ordre

$$\omega = u\,k - \epsilon k^3$$

Dispersif

- Par analogie avec les équations d’ondes
- La dispersion est liée aux erreurs de phase: toutes les longueurs ne vont pas à la même vitesse.
- Les erreurs dispersives créent des oscillations dans le champ de traceur, là où il ne devrait pas y en avoir
- Oscillations → création potentielle de valeurs extrémales, dont des valeurs négatives
- Valeurs négatives = gros problème pour certaines quantités: concentration de chlorophyle, humidité, salinité etc.

- Comment éviter ces oscillations ?

Interpolation non-linéaire

- De multiples techniques existent
  - Limiteur de flux : corriger le flux sur les bords si le flux induit la création d’un extremum.
  - PPM (piecewise parabolic method)
  - Mpdata (Smagorinsky)
  - WENO : weighted essentially non-oscillatory (Shu 1996)

WENO

- Exemple sur le WENO 5e ordre : si on prend 5 points autour de i+1/2, 3 upwind (i-2, i-1, i), 2 downwind (i+1, i+2), il y a 3 stencils upwind
  - (i-2, i-1, i), (i-1, i, i+1) et (i, i+1, i+2)
- Chacun donne un flux possible (du 3e ordre)
- Il existe une combinaison linéaire qui redonne le 5e ordre
- WENO: optimiser ces points en fonction de la courbure de q.
- La courbure est calculée à partir des dérivées d’ordre supérieures (ici dérivée seconde).

```python
def weno5(qmm, qm, q0, qp, qpp):
    """
    Fifth-order WENO reconstruction, from:
        Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes, Jiang and Shu,
        Journal of Computation Physics 126, 202-228 (1996)
    """
    qi1 = 1./3.*qmm - 7./6.*qm + 11./6.*q0
    qi2 = -1./6.*qm + 5./6.*q0 + 1./3.*qp
    qi3 = 1./3.*q0 + 5./6.*qp - 1./6.*qpp

    beta1 = k1 * (qmm-2*qm+q0)**2 + k2 * (qmm-4*qm+3*q0)**2
    beta2 = k1 * (qm-2*q0+qp)**2 + k2 * (qm-qp)**2
    beta3 = k1 * (q0-2*qp+qpp)**2 + k2 * (3*q0-4*qp+qpp)**2

    w1 = g1 / (beta1+eps)**2
    w2 = g2 / (beta2+eps)**2
    w3 = g3 / (beta3+eps)**2

    return (w1*qi1 + w2*qi2 + w3*qi3) / (w1 + w2 + w3)
```

WENO

- Il existe en fait une famille de WENO. WENO-JS, WENO-Z etc.
- Ils sont prévus pour être intégrés en temps avec le schéma RK3-SSP. [*empiriquement, le schéma LF-AM3 semble aussi bon*]
- Ils ont un critère de stabilité de CFL=1.63
- Mais leur propriété de positivité n'est assurée que pour des CFL plus petits (CFL<=1 pour le WENO-JS).
- A 2 ou 3 dimensions, WENO ne garantit pas que le traceur ne deviendra jamais négatif (cf. TP).
- WENO apporte de la dissipation implicite. Pas besoin d'ajouter un opérateur explicite de diffusion (laplacien ou bilaplacien).

Mixing vs stirring

- En français on utilise le mot “mélanger” pour désigner indistinctement le “mixing” et le “stirring”

- Stirring = Fabrication de filaments de traceur, par le champ de déformation.
  - Les filaments augmentent le périmètre d’un iso-contour de traceur.
  - Fabrication de petites échelles → jusqu’à dx !!!
  - Le stirring est un processus réversible. Les parcelles sont déformées/allongées mais restent avec leur “tag”
- Mixing = action de mélanger de manière irréversible (chaud+froid → tiède).

Lien entre stirring et mixing

- Au bout du compte le mixing est fait par la diffusion moléculaire.
- Le **stirring augmente le mixing** !!!
- C’est le principe du batteur, ou du mélangeur en chimie
- D’où le concept de **mélange turbulent, “turbulent mixing”**
- Ce mélange turbulent peut être totalement non résolu par la maille dx, ou partiellement résolu par la maille.
- Tout dépend si votre modèle résoud une partie de la turbulence.
- Dans tous les cas, il faut **paramétriser la partie du mixing associée au stirring sous-maille**.

Quelques conclusions tirées du TP

- Schémas centrés → dispersifs, conservation de la variance de q, réversibles, prix à payer: très oscillant, bruit numérique. La variance est conservée globalement mais pas en échelle spatiale.
- Schémas upwinds → diffusifs, destruction de variance de q (dissipation), irréversible. Un peu de dispersion (erreurs de phase). Moins de bruit numérique
- Schémas upwinds + WENO → diffusifs mais si ordre élevé (5e ordre), dissipation faible. Champs lisses tout en contenant des petites échelles. Pas de bruit numériques.

Perspectives

- Critiques de WENO
  - Boite noire : on ne controle pas comment la dissipation est faite.
  - C’est cher numériquement (plus qu’un schéma centré).
- Certes mais
  - On peut diagnostique très finement la dissipation
  - Bien implémenté ils ne sont pas si chers car ils maximisent l’intensité arithmétique = le nombre de flops /nombre de bytes transférés depuis la RAM vers le cpu / gpu.