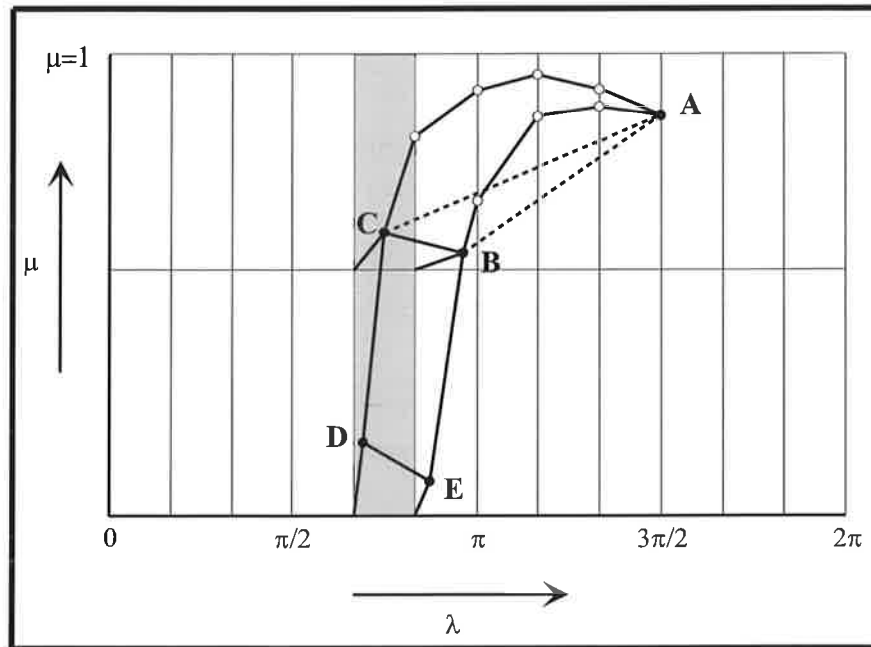




# Max-Planck-Institut für Meteorologie

## EXAMENSARBEIT Nr. 71



### ENTWICKLUNG UND TEST EINES MASSENERHALTENDEN SEMI-LAGRANGSCHEN TRANSPORTVERFAHRENS AUF DER KUGEL

von  
Markus Peter Olk

HAMBURG, Mai 2000

Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades

Autor:

Markus Peter Olk

Max-Planck-Institut  
für Meteorologie

Universität Hamburg  
Fachbereich:  
Geowissenschaften

MAX-PLANCK-INSTITUT  
FÜR METEOROLOGIE  
BUNDESSTRASSE 55  
D - 20146 HAMBURG  
GERMANY

Tel.: +49-(0)40-4 11 73-0  
Telefax: +49-(0)40-4 11 73-298  
E-Mail: <name> @ dkrz.de

**Entwicklung und Test eines massenerhaltenden  
semi-Lagrangischen Transportverfahrens  
auf der Kugel**

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften im Fachbereich  
Geowissenschaften  
der Universität Hamburg

vorgelegt von  
**Markus Peter Olk**  
aus Bitburg

Hamburg  
2000

**ISSN 0938-5177**

Als Dissertation angenommen vom Fachbereich Geowissenschaften der Universität Hamburg  
aufgrund der Gutachten

von            Dr. B. Machenhauer  
und            Dr. F. Lunkeit

Hamburg, den 14. April 2000

Prof. Dr. U. Bismayer  
Dekan  
des Fachbereichs Geowissenschaften

# Inhaltsverzeichnis

|  |           |
|--|-----------|
| Zusammenfassung  | III       |
| Abstract   | V         |
| <b>1. Einleitung</b>   | <b>1</b>  |
| 1.1 Entwicklung der semi-Lagrange Methode                        | 6         |
| 1.2 Die Erhaltung globaler Eigenschaften                         | 7         |
| 1.3 Aufbau der Arbeit  | 10        |
| <b>2. Ansätze zur Lösung des Erhaltungsproblems</b>              | <b>11</b> |
| 2.1 Teilchenorientierte semi-Lagrange-Verfahren                  | 13        |
| 2.2 Flußorientierte konservative Methoden                        | 17        |
| 2.3 Volumenorientierte konservative Methoden                     | 20        |
| <b>3. Die Zellintegrationsmethode in einer Dimension</b>         | <b>23</b> |
| 3.1 Die grundlegende Idee  | 23        |
| 3.2 Stückweise konstante Funktionen                              | 27        |
| 3.3 Stückweise lineare Funktionen                                | 30        |
| 3.4 Stückweise quadratische Funktionen                           | 32        |
| 3.5 Ergebnisse der Experimente in einer Dimension                | 35        |
| <b>4. Das Zellintegrationsverfahren in der Ebene</b>             | <b>43</b> |
| 4.1 Transportgleichung in zwei Dimensionen                       | 43        |
| 4.2 Trajektorienberechnung                                       | 45        |
| 4.3 Konservative Abbildung                                       | 45        |
| 4.3.1 Integration biquadratischer Funktionen                     | 45        |
| 4.3.2 Das Prinzip der akkumulierten Masse in einem Punkt         | 47        |
| 4.3.3 Eine Alternative: Die akkumulierte Masse einer Linie       | 52        |
| 4.4 Ergebnisse am Beispiel des rotierenden Zylinders             | 56        |
| <b>5. Das Zellintegrationsverfahren auf der Kugel</b>            | <b>61</b> |
| 5.1 Trajektorienberechnung auf der Kugel                         | 63        |
| 5.2 Advektion über den Pol                                       | 68        |
| 5.3 Die Berechnung der Schnittpunkte                             | 72        |
| 5.4 Quantitative Untersuchungen zum SLZI-Transport auf der Kugel | 75        |
| <b>6. Ergebnisse eines Experiments mit realen Daten</b>          | <b>89</b> |

|   |            |
|---|------------|
| <b>7. Erweiterungen und Ergänzungen des SLZI-Verfahrens</b> | <b>95</b>  |
| 7.1 Das SLZI-Verfahren in drei Dimensionen                  | 95         |
| 7.2 SLZI und semi-implizites Zeitschrittverfahren           | 98         |
| <b>8. Diskussion und Ausblick</b>                           | <b>101</b> |
| Danksagung  | 107        |
| Anhang A: Interpolation nach Newton-Gregory                 | 109        |
| Anhang B: Begründung von Bedingung (3.41)                   | 113        |
| Anhang C: Das IFS-Modell                                    | 115        |
| Anhang D: Ergebnisse zu Kapitel 5                           | 117        |
| Literaturverzeichnis  | 127        |

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein neues numerisches Verfahren entwickelt und getestet, das sogenannte semi-Lagrangsche Zellintegrationsverfahren (SLZI). Die Idee besteht darin, ein lokales Schema zu entwickeln, welches globale Integralinvarianten, wie z.B. die Gesamtmasse der Atmosphäre, erhält und ansonsten die bekannten positiven Eigenschaften semi-Lagrangischer Methoden zeigt. Die Entwicklung verläuft sukzessive von eindimensionalen Untersuchungen, über Tests in ebenen kartesischen Koordinaten bis hin zu den speziellen Bedingungen auf der Kugeloberfläche. In jedem Entwicklungsschritt wird am Ende ein Standardtest durchgeführt und die Ergebnisse mit der analytischen Lösung und mit einem traditionellen Verfahren verglichen. Neben den Experimenten mit analytisch lösba- ren Testsituationen wird auch ein Experiment mit realen Daten durchgeführt. Die Erweiterung der Methode auf drei Dimensionen wird ebenso diskutiert wie die Kombination des SLZI-Verfahrens mit dem semi-impliziten Zeitschrittverfahren. Neben der Anwendung als Transportschema werden noch einige Überlegungen zur Ausdehnung der Methode auf den kompletten Satz der primitiven Gleichungen angestellt.

Bei den Untersuchungen in einer Dimension liegt der Schwerpunkt zunächst in der konkreten Formulierung der neuen Methode. Dabei stellt sich heraus, daß man prinzipiell zwei Schritte unterscheiden kann. Zuerst wird in jeder Gitterzelle ein Polynom berechnet, welches die Verteilung einer Variablen in dieser Zelle repräsentiert und anschließend wird eine konservative Abbildung, bestehend aus Integralen über diese Polynome, zwischen dem Gitter zum alten und zum neuen Zeitpunkt durchgeführt. In dieser Arbeit werden als Polynome konstante, lineare und quadratische Funktionen verwendet und als Test wird zunächst der Transport eines Rechteck- bzw. Dreiecksignals analysiert. Es hat sich gezeigt, daß die numerische Genauigkeit der Methode um so größer ist, je höher der Grad der verwendeten Polynome ist. Schränkt man die Polynome weiter ein, indem man etwa Positivität oder gar Monotonie fordert, geht dies geringfügig zu Lasten der Genauigkeit.

Die Entwicklung des zweidimensionalen SLZI-Verfahrens in ebenen kartesischen Koordinaten hat den Fokus die konservative Abbildung derart zu gestalten, daß sie die Eigenschaften des eindimensionalen Verfahrens bestätigt und dabei möglichst effizient ist. Dabei hat sich gezeigt, daß eine sukzessive Anwendung von eindimensionalen Integrationen in Richtung der zwei Koordinatenachsen die Forderungen erfüllen kann. Als Testobjekt dient die gleichförmige Rotation eines Zylinders um den Mittelpunkt des Integrationsgebietes. Die Lösung ist dabei unabhängig von der Wahl der Koordinatenrichtung in welche zuerst integriert wird. Wie bei den eindimensionalen Tests hat sich bestätigt, daß die Verwendung

linearer Funktionen zu ähnlichen Eigenschaften führt wie die klassische semi-Lagrangsche bikubische Interpolation.

Auf der Kugeloberfläche wird der Standardtest, die Advektion einer kosinusförmigen Glockenfunktion direkt über den Pol, entlang des Äquators und in kleinen Abweichungen von diesen Extremen, untersucht. Insbesondere die Advektion direkt über den Pol zeigt, daß hier mit neuen Problemen zu rechnen ist. Die starke Krümmung und Drängung der Koordinatenlinien erfordert eine Modifikation des bisher entwickelten Schemas. Die Änderung beinhaltet im Wesentlichen die Berechnung von zusätzlichen Punkten, um die Fläche der Gitterzellen in Polnähe zum alten Zeitpunkt korrekt wiederzugeben. Die Verwendung eines Polfilters führt dann schließlich auch zu quantitativ zufriedenstellenden Resultaten. Gerade die besondere Behandlung der Gitterpunkte in der Nähe der Pole bietet aber auch Ansatzpunkte für weitere Verbesserungen. Experimente mit verschiedenen Auflösungen ergaben, daß mit höherer Gitterauflösung die SLZI-Methode, wie zu erwarten, eine genauere Lösung liefert. Die wichtige Frage nach der Effizienz des Verfahrens wird an dieser Stelle auch beantwortet. Dabei kam heraus, daß die Verwendung linearer Funktionen im SLZI-Schema zwar geringfügig aufwendiger ist als bikubische semi-Lagrangsche Interpolation, aber den zusätzlichen Vorteil der Massenerhaltung bietet. Will man höhere Genauigkeit erzielen, so kann dies durch quadratische Funktionen erreicht werden, wodurch die Methode etwa um den Faktor 1,6 mehr Rechenzeit benötigt.

Um das Verfahren mit realen Daten zu testen, mußte eine Situation gefunden werden, die über einen längeren Zeitraum annähernd zweidimensionale Strömungsverhältnisse bietet. Die Advektion potentieller Vorticity im Zeitraum 16-28 Januar 1992 auf der 450 K Isentrophenfläche konnte diese Anforderungen erfüllen. Neben der Bestätigung der bis dahin gewonnenen Ergebnisse wird deutlich, daß die genauere SLZI-Methode mit quadratischen Funktionen viel besser kleinskalige Strukturen simuliert als die bikubische semi-Lagrange Interpolation.



## Abstract

In the present study, a new numerical method is developed and tested, the so-called cell-integrated semi-Lagrangian scheme (CISL). The basic idea is to develop a local scheme which shows the well-known solid properties of semi-Lagrangian schemes and additionally conserves some global integral invariants. The development proceeds continuously from simple one-dimensional investigation and tests in the cartesian plane up to the special conditions on the sphere. At the end of every step a standard test is carried out and the results are compared with the analytical solution and a traditional method. Besides the experiments with analytical test cases an integration with realistic data is performed. The extension to a three-dimensional scheme is discussed as well as the combination of the CISL method with the semi-implicit time stepping. Additional to the design as a transport scheme some ideas to apply the method to the full set of primitive equations are presented.

The one-dimensional investigations concentrate above all on the practical formulation of the scheme. It turned out that in principle the new method could be divided in two steps. At first a polynomial which describes the spatial distribution of the variable is computed in every grid cell and subsequently a conservative remapping between the grid at previous time level and the grid at next time level is carried out using integrals over these polynomials. In the present paper constant, linear and parabolic functions are used and the first test case is the transport of a rectangular and a triangular wave. The experiments show that with higher degree of the polynomials a more accurate solution is achieved. Imposing additional conditions on the functions like positivity or monotonicity the accuracy is slightly smaller.

The focus of the tests in two-dimensional cartesian coordinates is to develop an efficient conservative remapping which maintains the properties from the one-dimensional experiments. It turned out that a cascade of one-dimensional integrations parallel to the coordinate lines might fit these requirements. The test case here is the solid body rotation of a cylinder and it ends up that the solution is independent of the sequence of integrations. Similar to the one-dimensional results the use of linear functions within the CISL scheme is comparable to the traditional semi-Lagrangian bicubic interpolation.

On the sphere the standard test, the advection of a cosine bell directly over the poles, around the equator and minor shifts from these two orientations, is performed. Especially the advection over the poles shows new problems under the conditions of spherical geometry. The strong curvature and the crowded coordinate lines near the poles require a modification of the scheme developed until now. The main changes are the calculation of additional points in order to reflect the area of the grid cell at previous time level more correct. Finally, the application of a pole filter leads to quantitatively sufficient results. But the specific treat-

ment of near pole grid points shows some promise for further improvements. Experiments with different grid resolutions result in more accurate solutions with CISL as the resolution increases. The important question of efficiency has been regarded now. CISL scheme with linear functions is slightly more expensive than semi-Lagrangian bicubic interpolation, but besides the same numerical properties the new method offers the additional advantage of the exact conservation of total mass. Higher accuracy can be achieved using parabolic functions which need a factor of 1,6 more computer time.

In order to test the method with realistic data a situation with an almost two-dimensional flow over a longer period has to be found. This is the case for the advection of potential vorticity during the period 16-28 January 1992 on the 450 K isentropic surface. Besides the confirmation of previous results the more accurate CISL scheme with parabolic functions simulates the small scale structures slightly better than the semi-Lagrangian bicubic interpolation.

## 1. Einleitung

Die Entwicklung von Atmosphärenmodellen erfordert die Berücksichtigung einer Vielzahl von Prozessen und Vorgängen unterschiedlicher Art, die ein großes Spektrum räumlicher und zeitlicher Skalen umfassen. Unabhängig davon welche Skala man betrachtet hat eine Strömung die Fähigkeit Substanzen oder Eigenschaften zu transportieren. Betrachtet man z.B. ein Volumenelement  $V_1$ , welches eine bestimmte Menge Luft umschließt und mit der Strömung an einen anderen Ort transportiert wird, läßt sich beobachten, daß das Volumenelement in der Regel deformiert wird und einige Zeit später den Raum  $V_2$  einnimmt. In Abb. 1.1 ist dieser Vorgang schematisch dargestellt.

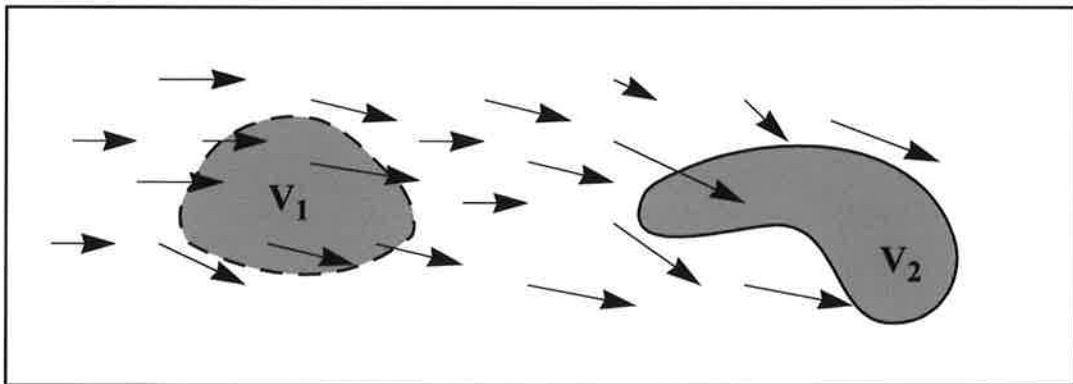


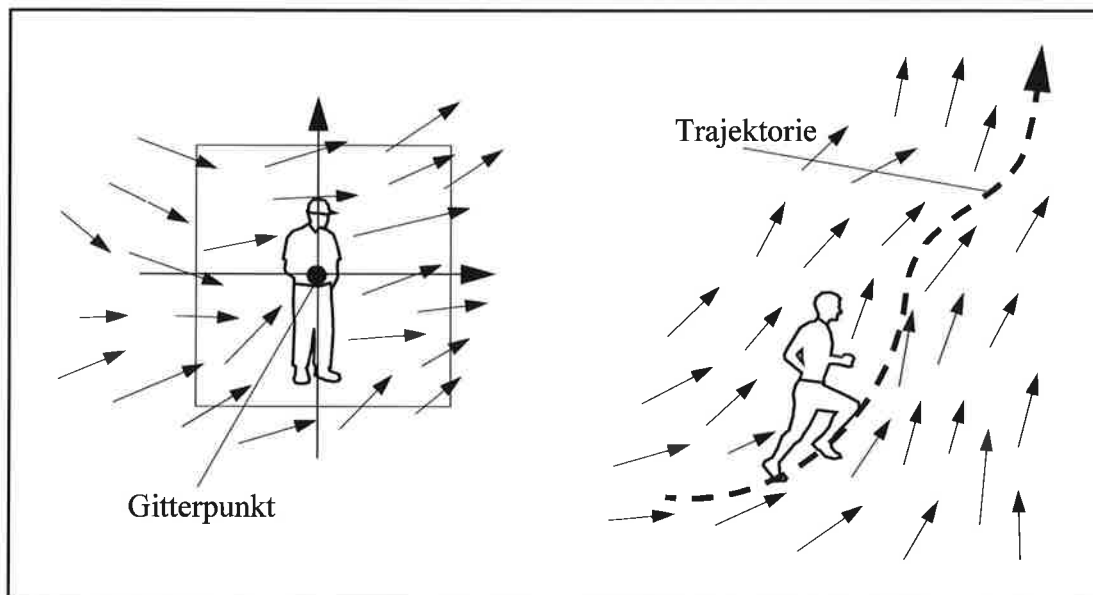
Abb. 1.1 Qualitative Darstellung des Transportes eines Volumenelements in einer Strömung. Die Pfeile stellen die Geschwindigkeitsvektoren der Strömung dar.  $V_1$  ist das Volumenelement zu Beginn des Transportvorgangs,  $V_2$  das Volumen nach einer bestimmten Zeit  $\Delta t$ .

Betrachtet man nun z.B. die gesamte Masse innerhalb des Volumenelements, dann bleibt diese während des Transportes erhalten, wenn im Innern keine Quellen und Senken vorhanden sind. Genaugenommen sieht man bei dieser Betrachtung vom diffusiven Massentransport durch die Wände des Volumenelements und vom eventuellen Eintritt oder Ausfall von Masse in Form von Niederschlag ab. Die mittlere Dichte innerhalb des Luftvolumens ändert sich hauptsächlich aufgrund der stattfindenden Volumenänderung. Diffusion und Niederschlagsprozesse können hier als sekundäre Effekte angesehen werden. In einem Klimamodell müssen natürlich alle Prozesse, die das Dichtefeld beeinflussen berücksichtigt werden, d.h. in diesem Beispiel Transport, Diffusion und Niederschlag.

Die wichtigsten physikalischen Gesetze, welche die Entwicklung der Atmosphäre beeinflussen sind die Erhaltung der Energie, das zweite Newton'sche Gesetz, was in der Bewegungsgleichung seinen Ausdruck findet und die Erhaltung der Masse. Die mathematische Darstellung des Entwicklungsproblems zeigt, daß es sich hierbei um nichtlineare, von Ort und Zeit abhängige, partielle Differentialgleichungen handelt, deren analytische Lösung im

Allgemeines nicht möglich ist. Daher wurden im Laufe der Zeit verschiedene Lösungsverfahren entwickelt, um numerische Lösungen eines vorliegenden Problems zu erhalten. Bei der Vielzahl an Lösungsverfahren ist eine vollständige Übersicht sehr schwierig, daher werden an dieser Stelle nur die wichtigsten Methoden und Begriffe kurz erklärt.

Eine erste wichtige Einteilung, die in Abb. 1.2 grob skizziert wurde, ist die Unterscheidung zwischen Euler-Verfahren und Lagrange-Verfahren. Diese Einteilung ist deshalb so fundamental, weil sich in ihr zwei grundlegend verschiedene Sichtweisen strömungsmechanischer Phänomene widerspiegeln. Die Eulersche Betrachtungsweise versteht die Strömung mit einem raumfesten Gitter und der Betrachter befindet sich an den Knoten des gedachten Gitters und erlebt wie sich die Strömung an seinem Ort im Laufe der Zeit verändert. Da die Knoten im allgemeinen regelmäßig über den Bereich, der von der Strömung eingenommen wird, verteilt sind erhält man die Information über den Zustand der Strömung durch die Auswertung aller Gitterpunkte. Im Falle der Lagrangschen Sichtweise reist der Beobachter mit den sich bewegenden Partikeln der Strömung mit und erlebt die zeitliche Entwicklung einer Strömungsvariablen am jeweiligen Ort des Partikels während seiner Reise. Die Bahn, welche ein Strömungspartikel bei seiner Bewegung im Raum durchläuft nennt man Trajektorie.



**Abb. 1.2** Konzeptioneller Unterschied zwischen Eulerscher und Lagrangscher Sichtweise. Links im Bild ist ein ortsfester Beobachter zu sehen, während in der rechten Hälfte der Beobachter sich mit der Strömung mitbewegt.

Ein Bild über den Zustand der gesamten Strömung ergibt sich, indem man eine große Zahl an Trajektorien verfolgt. Selbst wenn die Startpunkte der Trajektorien anfangs regelmäßig ver-

teilt sind, entwickelt sich, insbesondere in divergenten Geschwindigkeitsfeldern, im Laufe der Zeit ein ziemlich unregelmäßiges und ungeordnetes Bild von Trajektorien, so daß in der Praxis vieler meteorologischer Anwendungen eine Modifikation des Lagrange-Verfahrens benutzt wird. Dabei verfolgt man ein Ensemble an Trajektorien immer nur einen Zeitschritt lang und wählt im nächsten Schritt einen anderen Satz Trajektorien aus. Die Wahl erfolgt derart, daß die Trajektorien am Ende eines Zeitschritts an den Knoten eines regelmäßigen Gitters enden sollen. Diese Abwandlung des Lagrange-Verfahrens nennt man semi-Lagrange-Verfahren, es kombiniert die Vorteile der Lagrange-Verfahren mit dem Vorteil des regelmäßigen Gitters der Euler-Verfahren. Einen sehr umfangreichen Überblick über verschiedene Algorithmen zur Behandlung advektiver Prozesse in atmosphärischen Transport- und Chemiemodellen ist bei *Rood (1987)* zu finden und eine gute Zusammenfassung semi-Lagrangischer Verfahren liefern *Staniforth und Cote (1991)*.

Die Entwicklung verschiedener Verfahren zur Lösung der Gleichungen wurde im Laufe der Zeit meistens durch jeweils aktuelle Erfordernisse und die vorhandenen technischen Möglichkeiten vorangetrieben. Seit Beginn der numerischen Wettervorhersage bestand ein fundamentales Problem darin, daß explizite Zeitschrittverfahren nur bedingt stabil waren, d.h. der Zeitschritt mußte kleiner gewählt werden als die Zeit in der das schnellste Signal die kleinste im Model aufgelöste Distanz zurücklegt. Diese, als CFL-Kriterium bekannte, Stabilitätsbedingung wurde 1928 von Courant, Friedrichs und Lewy entdeckt, *Courant et al. (1928)*. Implizite Zeitschrittverfahren hingegen sind zwar unbedingt stabil, können aber aufgrund der komplizierten nichtlinearen Struktur im Allgemeinen nicht auf das komplette Gleichungssystem angewendet werden. Das schnellste sich in der Atmosphäre ausbreitende Signal sind Schallwellen. Da man aber in der Regel eine relativ geringe vertikale Auflösung benutzt, würden Schallwellen den erlaubten Zeitschritt auf unter eine Sekunde begrenzen. Da aber das Hauptinteresse meteorologischen Prozessen gilt, die sich sehr viel langsamer entwickeln, ist ein Zeitschritt im Sekundenbereich unnötig kurz. Deshalb benutzt man bis heute in allen Modellen die auf großer Skala arbeiten eine hydrostatische Approximation in der die vertikale Komponente der Bewegungsgleichung durch die hydrostatische Grundgleichung ersetzt wird. In diesem System, auch primitive Gleichungen genannt, ist die vertikale Ausbreitung von Schallwellen nicht mehr möglich.

Ein weiteres Problem von Modellen, die auf den primitiven Gleichungen basieren, sind Schwerewellen. Insbesondere externe Schwerewellen stellen Lösungen dar, die sich horizontal mit Geschwindigkeiten nahe der Schallgeschwindigkeit ausbreiten. Bei expliziten Zeitschrittverfahren ist damit ein Zeitschritt im Bereich weniger Minuten erforderlich, wenn man typische horizontale Auflösungen heutiger Klimamodelle zugrunde legt. Aber auch ein solcher Zeitschritt ist noch unnötig klein gemessen an den uns interessierenden

Skalen. Um dieses Problem zu umgehen, haben sich zwei verschiedene Ansätze entwickelt: Das erste ist ein "explizites Zeitsplittingverfahren" bei dem jeder Zeitschritt in zwei Teilschritte aufgespalten wird. Zunächst findet eine zeitliche Extrapolation über einen langen Zeitschritt statt, der alle Terme beinhaltet mit Ausnahme der linearen Terme, die für die Ausbreitung der Schwerewellen verantwortlich sind. Im Anschluß daran werden nur diese Terme in einer Serie von Extrapolationen mit einem kurzen Zeitschritt, der das CFL-Kriterium erfüllt, nachgeführt. Die zweite Alternative, die in *Kwizak und Robert (1971)* vorgestellt wurde, ist das semi-implizite Verfahren. Hierbei wird ein langer Zeitschritt benutzt und die linearen Schwerewellen implizit behandelt, alle anderen Terme der Tendenzgleichung jedoch explizit.

Die meisten der heutigen Klimamodelle sind semi-implizite, spektrale Modelle. Der Begriff Spektralmodell steht hier als Alternative zu den reinen Gitterpunktsmodellen. Die Unterschiede betreffen im wesentlichen den Aspekt der räumlichen Diskretisierung. Während die Diskretisierung und Lösung der Differentialgleichungen in Gitterpunktsmodellen im physikalischen Ortsraum stattfindet, ist bei den spektralen Methoden eine Transformation der Felder zwischen Ortsraum und Wellenzahlraum der entscheidende Schritt. Der Durchbruch gelang den Spektralmodellen mit Einführung einer effizienten Methode zur Behandlung der nichtlinearen Terme in der Vorticitygleichung, der sogenannten Transformationsmethode (*Eliassen et al., 1970; Orszag, 1970*). In den späten Siebzigern und den frühen Achtziger Jahren haben eine Reihe von Wettervorhersagezentren von Gitterpunktsmodellen zu Spektralmodellen gewechselt. Diesem Wechsel gingen einige Vergleichsstudien an verschiedenen Zentren voraus, wie z.B. *Jarraud und Girard (1984)*. Die größere Effizienz der Spektralmodelle, die einfache Lösung der Helmholtz-Gleichung und die leichte Behandlung von Horizontaldiffusion höherer Ordnung sowie die Beseitigung des Polproblems waren die ausschlaggebenden Gründe.

*Robert (1982)* fand heraus, daß selbst die Zeitschritte, welche das semi-implizite Zeitschrittverfahren erfordert, um die Stabilität der Advektionsterme sicherzustellen, immer noch unnötig klein sind. Das war ein Hauptgrund für *Robert et al., (1985)* Untersuchungen anzustellen, mit dem Ziel den semi-Lagrangischen Ansatz in Wettervorhersagemodellen, sowohl in spektralen Modellen als auch in Gitterpunktsmodellen, zu etablieren. Dieses Zeitschrittverfahren hat den Vorteil, daß der Advektionsterm nahezu unbedingt stabil integriert werden kann und die Wahl von  $\Delta t$  hängt nur noch von den jeweiligen Genauigkeitsanforderungen ab.

All den genannten Verfahren ist gemeinsam, daß sie das zu lösende System partieller Differentialgleichungen auf ein System algebraischer Gleichungen reduzieren. Wählt man z.B.

zur Diskretisierung der Differentialgleichung die Finite-Differenzen-Methode, werden Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzt und aus den Differentialgleichungen werden somit Differenzgleichungen. Welches Verfahren letztlich ausgewählt wird hängt oft von der Problemstellung und den daran geknüpften Anforderungen ab. Als erste und wichtigste Regel sollte man sich vor Augen halten, daß es keine Methode gibt, die als eindeutig beste bezeichnet werden kann, denn kein Verfahren ist frei von numerischen Fehlern. Eine ganze Reihe von Schemen ist für die spezielle Anwendung, für die sie entworfen wurden hervorragend geeignet, in anderen Fällen hingegen möglicherweise unbrauchbar. So wird in der festgeschriebenen Version des Klimamodells am Max-Planck-Institut für Meteorologie, ECHAM4, die Advektion von spezifischer Feuchte, Wolkenwasser und von chemischen Tracern durch ein formerhaltendes semi-Lagrangisches Schema von *Rasch und Williamson (1990a)* berechnet. Im Modell der nächsten Generation ist eine modifizierte Formulierung dieses Schemas vorgesehen, wie z. B. in einem Beitrag von *Rasch und Lawrence (1998)* nachzulesen ist. Die Advektion der anderen Größen wird mittels spektraler Transformation gelöst wird. Der Grund für die Sonderbehandlung der erstgenannten Variablen ist, daß sie in einem kleinskaligen Bereich stark variieren können und positiv definit sind. Diese Eigenschaften werden durch die spektral abgeschnittenen Felder nur unzureichend wiedergegeben.

Auch die Geometrie des zu lösenden Problems spielt eine wichtige Rolle. Verfahren die bei Fragestellungen in ein- oder zweidimensionalen kartesischen Koordinaten erfolgreich angewendet werden, sind nicht a priori auch auf Kugelkoordinaten übertragbar. Auf jeden Fall möchte man erreichen, daß die Eigenschaften der zugrundeliegenden Differentialgleichungen auch Eigenschaften der diskretisierten Gleichungen sind. Wie *Rood (1987)* zeigt, läßt sich schon am einfachen Beispiel der eindimensionalen Advektion von Rechteck- oder Dreieckprofilen mittels konstanter positiver Geschwindigkeit das klassische Verhalten numerischer Dispersion und Dissipation studieren. Obwohl diese Beispiele analytisch lösbar sind gibt es kein numerisches Verfahren, welches eine vollkommen dispersions- und dissipationsfreie exakte Lösung reproduziert.

Eine ganze Reihe unterschiedlicher Anforderungen werden, je nach vorliegendem Problem, an ein numerisches Verfahren gestellt. Ein Differenzenquotient wird meistens als Approximation einer Ableitung verwendet. Die Approximation wird als konsistent bezeichnet, wenn sie sich bei immer kleiner werdender Gitterweite der Ableitung nähert. Mathematisch ist hierbei ein Grenzübergang der Gitterweite gegen Null gemeint. Eine wichtige Eigenschaft, die eigentlich jeder Algorithmus erfüllen sollte, ist hinreichende numerische Genauigkeit. Setzt man die wahre Lösung einer Gleichung in das numerische Schema ein, erhält man ein Maß für die numerische Genauigkeit. Dazu muß man sich klar machen, daß die

wahre Lösung die numerische Gleichung immer nur bis auf einen Term  $\varepsilon$  erfüllt. Dieses  $\varepsilon$  wird als Abschneidefehler bezeichnet. Wenn man den Fehler in Form einer Taylor-Reihe darstellt, wird die niedrigste Potenz der Gitterweite bzw. des Zeitschritts in  $\varepsilon$  als Genauigkeitsordnung bezeichnet. Genaugenommen muß man zwischen räumlicher und zeitlicher Genauigkeit unterscheiden, da die kleinsten vorkommenden Potenzen der Gitterweite und des Zeitschritts nicht unbedingt gleich sind. Ferner ist zu beachten, daß eine hohe formale Genauigkeit, wie sie aus einer Taylorentwicklung des verwendeten Algorithmus abgeschätzt werden kann, nicht für jedes spezielle Problem automatisch eine genaue Lösung zur Folge hat. Ein gutes Beispiel ist die Behandlung von Schockwellen die per Definition eine Diskontinuität bilden, wodurch die Fehlerabschätzung aus Taylor-Reihen wenig aussagekräftig ist, *Colella und Woodward (1984)*.

Eine weitere Forderung, die man stellen, muß ist die Stabilität der numerischen Lösung, d.h. sie muß über den gesamten Integrationszeitraum gültig sein. Oft wird auch gefordert, daß der Algorithmus lokal ist. Dies bedeutet, daß die Lösung an einem Punkt nicht vom Feld an weit entfernten Punkten beeinflusst wird. Ein Verfahren wird als monoton bezeichnet, wenn sich bei reiner Advektion keine neuen Extrema bilden können. Diese Definition wird bei *Rasch und Williamson (1990a)* als shape-preserving bezeichnet, desweiteren findet man in der Literatur auch den Begriff "non-oscillatory", der in gleichem Sinne benutzt wird. Eine schwächere Forderung als Monotonie ist die Positivität einer Methode. Damit meint man, daß Felder die anfangs nur positive Werte haben auch positiv bleiben. Integriert man über lange Zeiträume, wie es in Klimasimulationen geschieht, ist die Erhaltung von z.B. Masse und Energie bedeutsam, da diesen fundamentale physikalische Prinzipien zugrunde liegen, deren Verletzung Auswirkung auf die Ergebnisse haben kann. Bei zunehmender Komplexität heutiger Modelle ist es neben den genannten Eigenschaften ebenso wichtig, ob das Verfahren leicht nachvollziehbar ist und auf einfachen Vorstellungen beruht. Schließlich ist es natürlich sinnvoll, daß das Verfahren effektiv ist und die nötige Rechenzeit in einem vernünftigen Verhältnis zu den erwarteten Verbesserungen steht.

## **1.1 Entwicklung der semi-Lagrange Methode**

Die Weiterentwicklung und Verbesserung numerischer Verfahren hat in den letzten 10-15 Jahren insbesondere auf dem Gebiet der semi-Lagrange-Methoden bedeutende Fortschritte erzielt. Von den ersten Ideen, die in den fünfziger und sechziger Jahren in den Arbeiten von *Fjørtoft (1952)*, *Wiin-Nielsen (1959)*, *Krishnamurti (1962)*, *Sawyer (1963)* und *Leith (1965)* entwickelt wurden fand sich in den siebziger Jahren keine nennenswerte Fortsetzung. Im Bereich der Meteorologie wäre lediglich die Arbeit von *Purnell (1976)* zu nennen. Es dauerte bis zur Mitte der achtziger Jahre, ab der eine konsequente und systematische Verbesse-



rung dieser Methode erfolgte. Am Anfang standen ein- und zweidimensionale Tests, *McDonald (1984)*, *Pudykiewicz und Staniforth (1984)*, *Staniforth und Pudykiewicz (1985)*, *Ritchie (1986)*, *McDonald (1987)*, *Temperton und Staniforth (1987)*, es folgte die Lösung der Flachwassergleichungen auf der Kugel, *Ritchie (1987)*, *Coté (1988)*, *Ritchie (1988)*, *Coté und Staniforth (1988)*, *McDonald und Bates (1989)*, *Bates et al. (1990)*, und schließlich experimentierte man mit komplexen dreidimensionalen Modellen und deren operationelle Anwendung, *Robert et al. (1985)*, *McDonald (1986)*, *McDonald und Bates (1987)*, *Tanguay et al. (1989)*, *Ritchie (1991)*, *Leslie und Purser (1991)*. Die wichtigste Anwendung ist zweifellos die Behandlung der Advektion in Atmosphären- und Tracertransportmodellen. Das wachsende Interesse an semi-Lagrangscher Advektion ist auf eine ganze Reihe positiver Eigenschaften zurückzuführen. Die bedeutendste Eigenschaft ist die Überwindung des CFL-Kriteriums. Außer dem längeren Zeitschritt sind hohe numerische Genauigkeit, ein kleiner Phasenfehler und geringe numerische Dispersion ein weiteres Vorteil. Die Arbeiten von *Robert (1981, 1982)* haben ferner gezeigt, daß sich die semi-Lagrangsche Methode sehr gut mit dem semi-impliziten Zeitschrittverfahren verbinden läßt. Die Monotonie oder Positivität eines Signals kann durch zusätzliche Bedingungen ebenfalls erreicht werden.

## 1.2 Die Erhaltung globaler Eigenschaften

Ein Nachteil ist aber, daß semi-Lagrange-Verfahren die formale Erhaltung globaler Integralinvarianten, wie z.B. die Gesamtmasse innerhalb des Modellgebietes, die Gesamtenergie der Strömung, der Gesamtdrehimpuls oder aber das Mischungsverhältnis passiver chemischer Konstituenten, nicht gewährleisten. In Modellen, die zur numerischer Wettervorhersage benutzt werden und damit Integrationszeiten von typischerweise bis zu 10 Tagen haben mag dieser Mangel kein ernsthaftes Problem darstellen. Bei langen Integrationen, wie sie in der Klimaforschung üblich sind, kann man die Auswirkungen aber nicht mehr vernachlässigen.

*Moorthi et al. (1995)* berichten über ein Experiment in welchem sie eine systematische Massenzunahme beobachteten. Bei dem verwendeten Modell handelte es sich um ein semi-implizites semi-Lagrangsches Globalmodell mit vollständiger physikalischer Parametrisierung. Die Anfangsfelder waren Analysedaten vom 1. November 1992 um 00 UTC. Während der siebzehnmonatigen Integration stieg der global gemittelte Bodendruck um 34 hPa an, die Anstiegsrate war nicht zeitlich konstant. Mit der Wahl anderer Modellparameter konnte die Zunahme zwar erheblich reduziert werden, aber die im Experiment benutzten Parameter lieferten andererseits die beste Vorhersagegüte und Klimastatistik.

Laprise (1988) zitiert eine Integration die mit einem spektralen Modell und Eulerschem Zeitschrittverfahren durchgeführt wurde. Die horizontale Auflösung war T20 und vertikal hatte man 10 Level zur Verfügung. Hier wurde ein Nettomassenverlust beobachtet, der einer Abnahme des global gemittelten Bodendrucks von 0.3 hPa pro Jahr entspricht.

Ein weiteres Beispiel ist die Arbeit von Gravel und Staniforth (1994). Sie benutzten ein semi-Lagrangisches Flachwasser-Modell und führten 100 Tage Integrationen bei 4 verschiedene Auflösungen durch. Der verwendete Zeitschritt war in allen Fällen  $\Delta t = 6$  min. In der Abb. 1.3 ist die mittlere geopotentielle Höhe als Funktion der Zeit dargestellt. Man erkennt, daß bei keiner Auflösung die Gesamtmasse erhalten bleibt und die Nichterhaltung ist bei der groben Auflösung am größten, während bei der feinen Auflösung die Erhaltung noch am besten gewährleistet ist. Ob ein Massenverlust oder eine Massenzunahme vorliegt, ist in diesem Modell auflösungsabhängig.

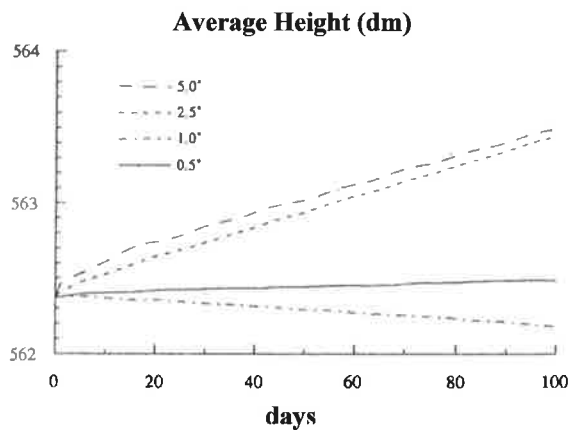


Abb. 1.3 Figur 1 aus Gravel und Staniforth (1994). Mittlere geopotentielle Höhe als Funktion der Zeit bei vier verschiedenen Auflösungen, die in der Abbildung durch unterschiedliche Linientypen dargestellt sind.

Schließlich bestätigen auch die Untersuchungen, die mit Hilfe des operationellen Modells am Europäischen Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage (EZMWF) durchgeführt wurden (Machenhauer, persönliche Mitteilung) die bisher gewonnenen Erkenntnisse. Den Experimenten lag Modellzyklus 39 zugrunde und die Integrationszeit betrug 120 Tage mit beobachteter Meeresoberflächentemperatur (SST), von Mai bis August 1987. Zudem wurden einmal eine semi-Lagrangische Version (SL) mit einem Zeitschritt von  $\Delta t = 22.5$  min und eine Eulersche Version (EU) mit  $\Delta t = 15$  min in T63 Auflösung verglichen. In Abb. 1.4 ist der zeitliche Verlauf des global gemittelten Bodendrucks des semi-Lagrangischen Experiments dargestellt und Abb. 1.5 zeigt das Resultat für das Eulersche Modell.

ps (hPa) cy 39 mgb Mai-Aug 87

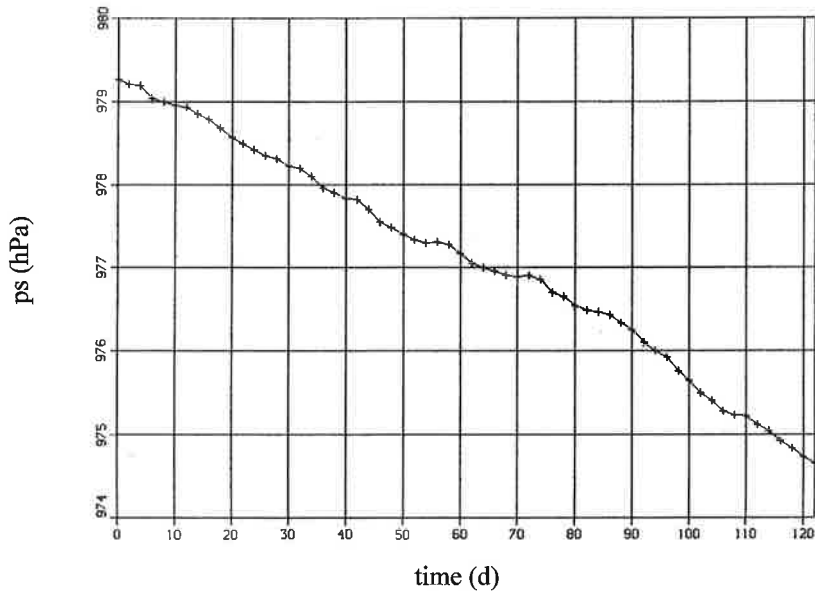


Abb. 1.4 Global gemittelter Bodendruck während der Integrationsperiode mit der SL-Modellversion.

ps (hPa) cy 39 mhq Mai-Aug 87

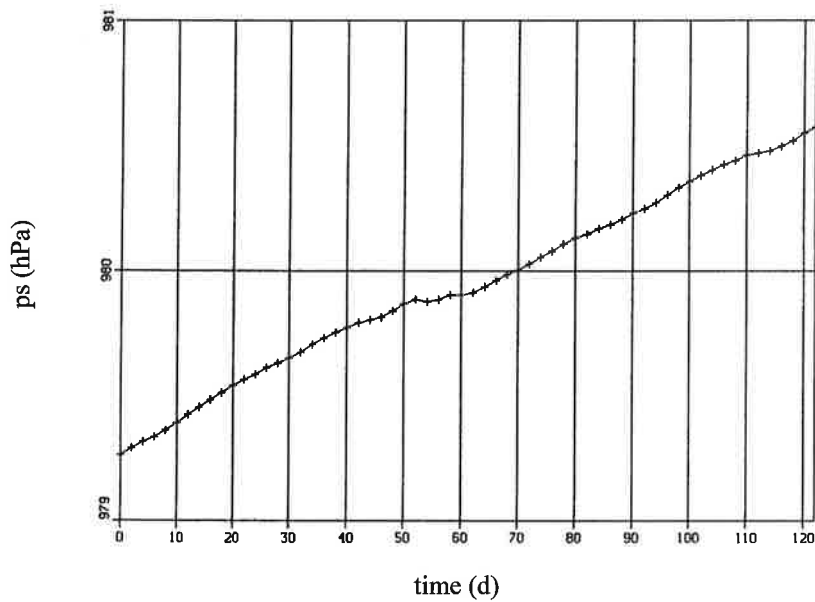


Abb. 1.5 Global gemittelter Bodendruck während der Integrationsperiode mit der EU-Modellversion.

Im ersten Fall kann man einen systematischen Massenverlust entsprechend einer Abnahme von etwa 4.5 hPa beobachten, im letzten Fall hingegen eine Massenzunahme entsprechend etwa 1 hPa. Bei allen Experimenten ist es naheliegend anzunehmen, daß sich Fehler in der Vorhersagegleichung für den Bodendruck systematisch anhäufen. Die großen Abweichungen im global gemittelten Bodendruck lassen vermuten, daß die lokalen Fehler sogar noch größer sind. Die dreidimensionale Struktur dieses Fehlers ist ebenso unbekannt wie mögliche Auswirkungen auf die interne Dynamik des Modells. Der Fehler ist zwar bei der Eulerschen Version kleiner als bei den semi-Lagrangschen Experimenten, dennoch möchte man die positiven Eigenschaften der semi-Lagrangschen Methode nicht aufgeben. Ein globaler Massenfikser, der in diesem Modell schließlich verwendet wurde um die Massenerhaltung zu gewährleisten, ist nur eine unbefriedigende Lösung. Aufgrund der lokalen Natur des numerischen Fehlers scheint eine globale Korrektur nicht geeignet das Problem zu lösen, da die Korrekturen dann nicht ausschließlich an den Stellen wirken an denen auch der Fehler auftritt.

### **1.3 Aufbau der Arbeit**

Nach dieser Einleitung folgt im zweiten Kapitel ein Überblick verschiedener Entwicklungen im Bereich semi-Lagrangscher Methoden, die sich dem Aspekt der Massenerhaltung widmen. Vor- und Nachteile der jeweiligen Verfahren werden diskutiert. Im dritten Kapitel folgt dann eine Beschreibung des in dieser Arbeit vorgestellten und getesteten Ansatzes in einer Dimension. Einfache Experimente erlauben eine erste Beurteilung der Eigenschaften und der Brauchbarkeit dieser Methode. In Kapitel 4 wird dann gezeigt, wie die Methode auf zweidimensionale Probleme ausgedehnt werden kann. Dies wird zunächst in kartesischen Koordinaten vollzogen bevor dann im fünften Kapitel die speziellen Probleme in Polnähe bei Fragestellungen in sphärischen Koordinaten diskutiert werden. Dann wird auch das Verhalten bei verschiedenen Auflösungen anhand des einfachen Beispiels der Advektion einer zweidimensionalen, kosinusförmigen Glockenfunktion beleuchtet. Der Transport erfolgt dabei direkt über den Pol, entlang des Äquators und jeweils in kleinen Winkeln abweichend von diesen Extremfällen. Im sechsten Kapitel wird dann eine Situation mit realen Windfeldern getestet. Die transportierte Größe ist hier die potentielle Vorticity. Nach den zweidimensionalen Experimenten wird schließlich im siebten Kapitel gezeigt, wie die Erweiterung auf drei Dimensionen funktionieren kann. Ferner wird über die Anwendung des Verfahrens auf den kompletten Satz der primitiven Gleichungen nachgedacht und über die Verbindung des neuen Verfahrens mit dem semi-impliziten Zeitschrittverfahren diskutiert. Im achten Kapitel werden die Ausführungen dann mit einer Diskussion und einem Ausblick beschlossen.

## 2. Ansätze zur Lösung des Erhaltungproblems

Die Möglichkeit bei semi-Lagrange-Verfahren ohne Verlust an Genauigkeit einen längeren Zeitschritt zu wählen als bei Euler-Verfahren hat dazu geführt, daß diese Methode in den letzten Jahren zunehmend Einzug in Modelle der numerischen Wettervorhersage gefunden hat. Für Klimasimulationen ist diese Methode natürlich besonders interessant, da der längere Zeitschritt verbunden mit hoher numerischer Genauigkeit eine Steigerung der Effizienz verspricht, die gerade bei langen Integrationszeiten wünschenswert ist. Andererseits ist der Nachteil, daß die Methode in Bezug auf die Erhaltung global integrierter Eigenschaften nicht konservativ ist, bei Integrationszeiten von mehreren Monaten bis mehreren Jahrzehnten besonders schwerwiegend. So ist es nicht verwunderlich, daß diesem Problem in den letzten Jahren von unterschiedlichen Gruppen, die sich mit der Weiterentwicklung numerischer Methoden beschäftigen, besondere Aufmerksamkeit gewidmet wurde. Im folgenden werde ich einen Überblick über bisher entwickelte Ansätze geben, wobei ich mich aus den schon geschilderten Gründen auf semi-Lagrangsche Methoden beschränke. Ebenso erhebe ich keinen Anspruch auf Vollständigkeit der Aufzählung. Zunächst aber möchte ich die Prinzipien der semi-Lagrange-Methode, die allen folgenden Ausführungen zugrunde liegt anhand eines einfachen Beispiels erläutern.

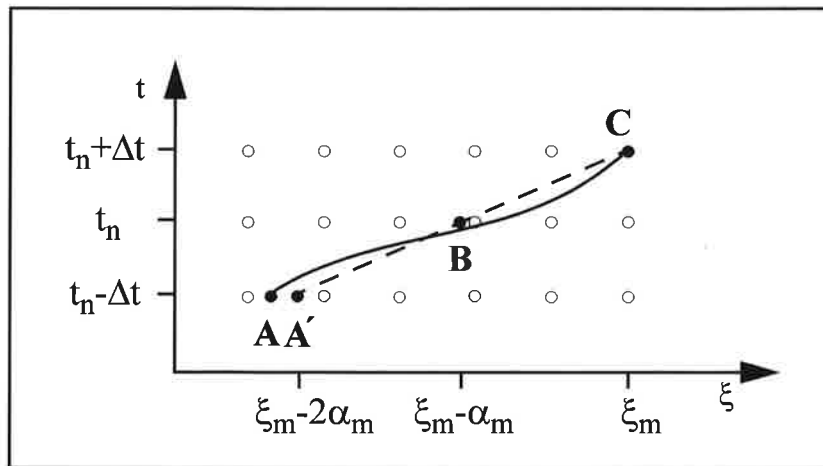
Das klassische Problem der passiven Advektion eines skalaren Feldes in einer Dimension eignet sich dazu in besonderer Weise. Die Gleichung dazu lautet:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial\phi}{\partial\xi} = 0. \quad (2.1)$$

Hier bezeichnet  $\phi = \phi(\xi, t)$  das zu transportierende skalare Feld, das nur von der Zeit  $t$  und der räumlichen Koordinate  $\xi$  abhängt und für das eine Anfangsbedingung  $\phi(\xi, 0)$  vorgegeben ist.  $d\xi/dt = u(\xi, t)$  ist die Geschwindigkeit mit der das Feld transportiert wird. Gleichung (2.1) bringt zum Ausdruck, daß  $\phi$  entlang einer Trajektorie konstant ist. Setzt man die Advektionsgeschwindigkeit  $u(\xi, t) = c(\xi)$  zeitlich konstant, läßt sich sogar eine analytische Lösung für das Problem angeben.

In Abb. 2.1 sind die Verhältnisse für ein sogenanntes Drei-Schritt-Verfahren vereinfacht dargestellt, wobei sich der Zusatz 'Drei' auf die Anzahl der involvierten Zeitebenen bezieht. Die Darstellung und Notation ist in Anlehnung an Figur 1 aus *Staniforth und Cote (1991)* gewählt. Die durchgezogene Kurve AC in der  $(\xi-t)$ -Ebene bezeichnet die exakte Trajektorie, die zum Zeitpunkt  $t_n + \Delta t$  am Gitterpunkt mit der Koordinate  $\xi_m$  endet,  $n$  bzw.  $m$  sind der zeitliche bzw. räumliche Laufindex. Da man diese aber im allgemeinen nicht kennt

wird sie durch eine lineare Trajektorie A'C approximiert, die in der Abbildung als gestrichelte Linie dargestellt ist.



**Abb. 2.1** Schematische Darstellung eines Drei-Schritt-Verfahrens: Die durchgezogene Linie stellt die exakte Trajektorie dar, die zum Zeitpunkt  $t_n + \Delta t$  am Gitterpunkt  $\xi_m$  endet. Die gestrichelte Linie stellt die approximierte Trajektorie dar.  $\alpha_m$  ist die Distanz, um die das Luftpaket während  $\Delta t$  nach  $\xi_m$  verschoben wurde.

A' heißt Anfangs- oder Startpunkt, B Mittelpunkt und C Endpunkt der Trajektorie. Unter der Annahme, daß  $\phi(\xi, t)$  an allen Gitterpunkten  $\xi_m$  zu den Zeitpunkten  $t_n - \Delta t$  und  $t_n$  bekannt ist läßt sich das Feld an diesen Gitterpunkten zur Zeit  $t_n + \Delta t$  aus der diskretisierten Form von Gleichung (2.1) bestimmen. Diese lautet

$$\frac{\phi(\xi_m, t_n + \Delta t) - \phi(\xi_m - 2\alpha_m, t_n - \Delta t)}{2\Delta t} = 0, \quad (2.2)$$

wobei  $\alpha_m$  die Distanz ist, die das Luftpaket in der Zeit  $\Delta t$  zurücklegt. Wenn dieser Wert bekannt ist, kann man  $\phi$  am Endpunkt der Trajektorie einfach durch Interpolation des Feldes am Anfangspunkt ( $\xi_m - 2\alpha_m$ ) berechnen. Um  $\alpha_m$  zu bestimmen nützt man die Tatsache, daß der Kehrwert der Steigung der Trajektorie gleich der Geschwindigkeit am Mittelpunkt der Trajektorie ist, es ergibt sich

$$\alpha_m = \Delta t u(\xi_m - \alpha_m, t_n). \quad (2.3)$$

Gleichung (2.3) ist implizit und kann mit Hilfe folgender Beziehung iterativ gelöst werden:

$$\alpha_m^{(k+1)} = \Delta t u(\xi_m - \alpha_m^{(k)}, t_n), \quad (2.4)$$

mit einer geeigneten Anfangsbedingung  $\alpha_m^{(0)}$ . Die Geschwindigkeit  $u$  muß dabei zwischen Gitterpunkten interpoliert werden. Der Algorithmus lautet nunmehr:

- Berechne  $\alpha_m$  an allen Gitterpunkten  $\xi_m$  mit Hilfe von (2.4).
- Berechne  $\phi$  an allen Startpunkten  $(\xi_m - 2\alpha_m)$  durch ein geeignetes Interpolationsverfahren.
- Ermittle  $\phi$  zum neuen Zeitpunkt  $t_n + \Delta t$  an den Punkten  $\xi_m$  aus (2.2).

Dieses Verfahren ist mehrfach verändert und verbessert worden. Den größten Spielraum bietet zum einen die Art und Weise der Interpolationen und zum anderen haben beispielsweise *Temperton und Staniforth (1987)*, sowie *McDonald und Bates (1987)* die erfolgreiche Erweiterung zu einem Zwei-Schritt-Verfahren demonstriert. Weiterhin konnte gezeigt werden, daß es ausreichend ist für die Bestimmung der  $\alpha_m$  eine lineare Interpolation zu verwenden wenn für die Interpolation von  $\phi$  an den stromaufwärtsgelegenen Punkten kubische Interpolation benutzt wird. Die Anzahl der Iterationen kann auf zwei beschränkt werden, *Staniforth und Pudykiewicz (1985)*, *Temperton und Staniforth (1987)*, *Bates et al. (1990)*.

Eine ganze Reihe von Modifikationen hat sich damit befaßt das klassische semi-Lagrange-Schema so zu verändern, daß die Erhaltung global integrierter Eigenschaften gewährleistet ist. Eine Unterscheidung, die unterschiedliche Konzepte repräsentiert, ist für eine erste Einteilung ganz hilfreich. Auf der einen Seite steht die Idee individueller Strömungsteilchen, die sich mathematisch in Gitterpunkten äußern. Auf der anderen Seite steht die Vorstellung von Boxen oder Zellen, die durch Gitterpunkte definiert werden und innerhalb derer sich die zu untersuchende Eigenschaft kontinuierlich verteilt. Letztere läßt man noch unterteilen in Methoden die den Fluß einer Eigenschaft durch die Wände der Gitterbox in den Mittelpunkt stellen und in Verfahren, die den Transport einer ganzen Box betrachten. *Rood (1987)* hat erstere als 'teilchenorientierte' Verfahren bezeichnet während er letztere als 'volumenorientierte Verfahren' klassifiziert hat. Eine Art Mittelstellung nehmen in dieser Klassifizierung die flußorientierten Verfahren ein. Unter diesem Gesichtspunkt wird nun die Modifikation klassischer semi-Lagrange-Methoden zu konservativen Verfahren unterschieden.

## 2.1 Teilchenorientierte konservative semi-Lagrange-Verfahren

*Rasch und Williamson (1990a)* untersuchten intensiv den semi-Lagrangischen Transport von Wasserdampf. Als Grundlage des Vergleichs nahmen sie einmal ein klassisches semi-Lagrangisches Transportschema mit einer Interpolation basierend auf Lagrangischen Polynomen und zum zweiten einen gestalterhaltenden Algorithmus dessen Entwicklung in den Arbeiten von *Rasch und Williamson (1990b)*, *Williamson und Rasch (1989)* und *Williamson (1990)* beschrieben ist. Ein Merkmal ihrer Methode ist, daß die Erhaltungseigen-

schaft nicht implizit durch das verwendete Verfahren erfüllt wird sondern durch zusätzliche Bedingungen quasi erzwungen wird. Die zusätzlichen Bedingungen werden in ihrer Arbeit Fixer genannt und wirken sich auf die Eigenschaft der Positivität und Erhaltung der totalen Masse des Wasserdampfes aus. Die Anwendung klassischer Interpolationsverfahren höherer Ordnung zur Bestimmung der spezifischen Feuchte führt einerseits zu negativen Werten und andererseits zu systematischer Massenzunahme oder Massenabnahme. Um diese Defizite zu beheben, gehen *Rasch und Williamson (1990a)* im wesentlichen folgendermaßen vor:

- Anwendung eines lokalen Fixers  $F_L$  (*Williamson et al., 1987*) der negative Werte von  $q$  an einem Gitterpunkt auf Null setzt und dabei die fehlende Masse von den Nachbarpunkten abzieht, dessen Masse dabei proportional reduziert wird. Ist an den Nachbarpunkten nicht genügend Masse vorhanden passiert zunächst nichts und das Verfahren wendet sich dem nächsten Punkt zu. Diese Prozedur wird fortlaufend in allen Breitenkreis-Höhe Ebenen durchgeführt.
- Unter Schritt 1 kann der Fall eintreten, daß die benachbarten Punkte nicht genügend Masse zur Verfügung stellen können und negative  $q$ -Werte übrigbleiben. Dann wird ein globaler Fixer  $F_G$  eingesetzt der die negativen Werte auf Null setzt.
- Eine Massenbilanzierung entscheidet nun über den Umfang der noch notwendigen Renormalisierung. Dazu werden alle Werte von  $q$  mit einer Konstanten multipliziert, so daß die Gesamtmasse derjenigen vor Beginn des semi-Lagrangischen Advektionschritts entspricht.

Ein Nachteil der beschriebenen Prozedur liegt darin, daß die Massenerhaltung lediglich durch globale Verteilung des Massendefizits erreicht wird, obwohl der Fehler lokal unterschiedlich groß ist. Einige Hinweise in obiger Untersuchung lassen vermuten, daß der Fehler in Regionen mit großem Gradienten der betreffenden Eigenschaft besonders groß ist. Der größte Fehleranteil fällt daher auf den vertikalen Transport. Weiterhin ist zu bedenken, daß die Massenverlagerung infolge des Fixers selbst einen Transport von Masse darstellt, dem kein erkennbarer physikalischer Prozeß zugrunde liegt.

Die Methode von *Priestly (1993)* stellt eine Erweiterung der quasi-monotonen semi-Lagrange-Methode von *Bermejo und Staniforth (1992)* dar. Diese basiert auf der Monotoniebedingung, daß ein interpolierter Wert zwischen dem Maximum und Minimum der vier benachbarten Gitterpunkte liegen muß. Benutzt man eine Kombination zwischen linearer Interpolation und einer Interpolation höherer Ordnung, so kann die Monotoniebedingung durch den Spielraum, der sich durch die unterschiedliche Gewichtung der Interpolationen ergibt, erfüllt werden. Priestly wählt diese Gewichtung so, daß die Monotoniebedingung zwar erfüllt bleibt aber die kombinierte Lösung nicht unbedingt möglichst nahe an der Lösung der Interpolation höherer Ordnung liegt. Wenn  $\alpha_k$  den Gewichtungsparameter bezeichnet und  $\alpha_k^{\max}$  den optimalen Wert am Gitterpunkt  $k$ , dann ist



$$0 \leq \alpha_k \leq \alpha_k^{\max}. \quad (2.5)$$

Dadurch gewinnt er zusätzlichen Spielraum für die Erfüllung einer weiteren Bedingung, nämlich die Erhaltung einer global integrierten Eigenschaft. Ziel seines Algorithmus ist nach jedem Zeitschritt die Minimierung der Differenz zwischen der totalen Masse der Eigenschaft zu Beginn der Integration und der totalen Masse der Eigenschaft nach den Interpolationen des jeweiligen Zeitschrittes. Dazu wird  $\alpha_k$  an einigen Stellen  $k$  weiter in Richtung linearer Interpolation verschoben.

*Gravel und Staniforth (1994)* haben diesen Algorithmus auf die Flachwassergleichungen ausgedehnt um auch Größen wie die Gesamtmasse der Strömung zu erhalten, die im Gegensatz zu passiv transportierten Größen nicht explizit in den Gleichungen vorkommen. Das Verfahren stellt sich dann folgendermaßen dar:

- Zu Beginn der Integration wird einmal die Gesamtmasse der Atmosphäre  $M^{(0)}$  aus dem zeitabhängigen Teil des Geopotentials berechnet. Alle folgenden Schritte werden zu jedem Zeitschritt durchgeführt.
- Je eine lineare und kubische Interpolation des entsprechenden Anteils der Kontinuitätsgleichung am Anfangspunkt der Trajektorie.
- Berechnung des optimalen Koeffizienten  $\alpha$  der einerseits die kubische Interpolation möglichst hoch gewichtet und andererseits die Monotoniebedingung, wie oben beschrieben, nach Bermejo und Staniforth erfüllt.
- Berechnung der neuen Gesamtmasse der Atmosphäre  $M^{(\text{neu})}$ .
- Falls  $M^{(\text{neu})}$  größer (kleiner) als  $M^{(0)}$  ist, werden die Koeffizienten  $\alpha$  an denjenigen Gitterpunkten erniedrigt wo die kubische Interpolation einen größeren (kleineren) Wert liefert, vorausgesetzt die Korrektur verletzt weiterhin nicht die Monotoniebedingung.

Der recht einfache Ansatz von *Gravel und Staniforth (1994)* hat gegenüber dem Prinzip der Gleichverteilung des Massendefizits bzw. Massenüberschuß auf alle Gitterpunkte den Vorteil, daß eine Korrektur nur an einigen wenigen Punkten erfolgt. Allerdings ist zu bemängeln, daß die Größenordnung dieser Korrektur eine gewisse Beliebigkeit zuläßt und im Endeffekt eine Art Gleichverteilung unter den in Frage kommenden Gitterpunkten stattfindet. Weiterhin beinhaltet diese Methode auch die Möglichkeit, daß an einigen Punkten keine Korrektur vorgenommen wird, wenn nämlich dadurch die Monotoniebedingung wieder verletzt würde. Die in Kapitel 1.2 erwähnten Experimente von Gravel und Staniforth liefern bei einer Auflösung von 2.5 Grad nun folgende Ergebnisse.

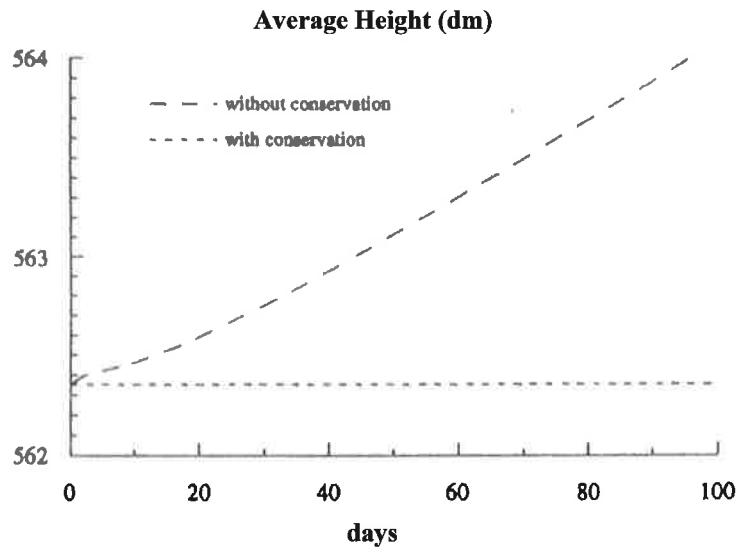


Abb. 2.2 Figur 2 aus Gravel und Staniforth (1994). Darstellung der mittleren geopotentiellen Höhe mit und ohne Massenerhaltung

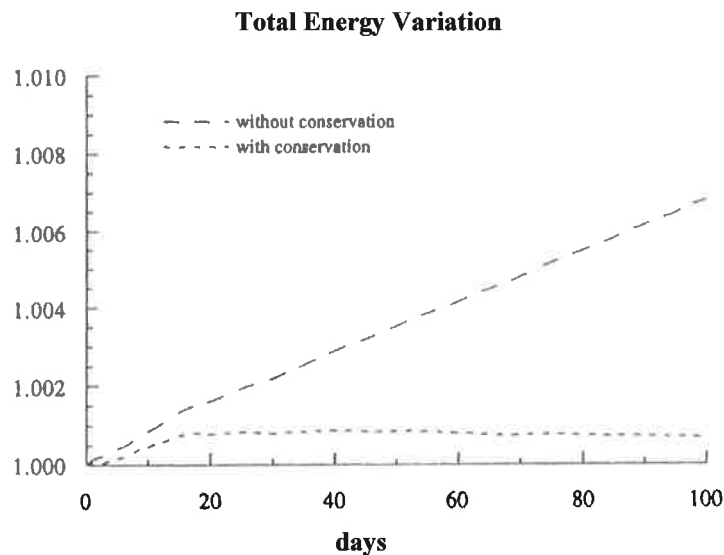


Abb. 2.3 Figur 4 aus Gravel und Staniforth (1994). Veränderung der normierten Gesamtenergie mit und ohne Massenerhaltung

Ein interessanter Nebeneffekt ist, wie in Abb. 2.3 zu sehen ist, daß als Folge der Massenerhaltung auch die Erhaltung der Gesamtenergie signifikant verbessert wird. Allerdings ist dies zu verstehen, wenn man bedenkt, daß sich in einem Flachwassermodell die Gesamtenergie aus kinetischer und potentieller Energie zusammensetzt, es ist

$$E_{TOT} = 0,5 \cdot hV^2 + 0,5 \cdot gh^2. \quad (2.6)$$

Letzterer ist der weitaus dominierende Anteil und die Erhaltung der Gesamtmasse wirkt sich natürlich direkt darauf aus. In Gleichung (2.6) ist  $V$  der Betrag der Geschwindigkeit,  $g$  die Gravitationsbeschleunigung und  $h$  die Höhe.

Schließlich muß auch noch das von *Leslie und Purser (1995)* entwickelte dreidimensionale massenerhaltende semi-Lagrange-Schema erwähnt werden, da hier einige neue Gedanken auftauchen. Einzelne Schritte dieser Methode sind in früheren Arbeiten schon entwickelt worden, wie z.B. in *Purser und Leslie (1988, 1991 und 1994)* sowie *Leslie und Purser (1991)*. Der Kern ihres Verfahrens besteht darin als Ausgangspunkt anstelle der zu erhaltenden Größe dessen Integral zu betrachten. Da sie, im Gegensatz zu den bisher vorgestellten Methoden, Vorwärtstrajektorien benutzen, müssen sie ausgehend von der Dichteverteilung auf dem Lagrangschen Gitter schrittweise zu der neuen Verteilung auf Eulerschen Gitterpunkten gelangen. Dies wird durch eine Kaskade von Operationen (Integration, Interpolation und Differentiation) für jede Koordinatenrichtung einzeln vollzogen währenddessen die anderen Richtungen festgehalten werden, *Leslie und Purser (1995)*. Da die Kaskadentechnik mit eindimensionalen Operationen auskommt ist der Rechenaufwand verhältnismäßig gering. Die Autoren erwähnen aber auch, daß die Methode nur funktioniert, wenn die Verzerrungen des Lagrangschen Gitters über einen Zeitschritt nicht zu groß sind. Insbesondere in der Nähe der Pole kann es ihrer Meinung nach zu einer Verletzung dieser Bedingung kommen und die Methode liefert dann keine zufriedenstellenden Ergebnisse.

## 2.2 Flußorientierte konservative Methoden

In diesem Abschnitt werden Methoden vorgestellt, die das Problem unter dem Aspekt des Transports eines bestimmten Volumens sehen. Obwohl einige der im folgenden erwähnten Verfahren keine semi-Lagrange-Verfahren in oben beschriebenem Sinn sind, werden sie aufgrund konzeptioneller Ähnlichkeiten, die einen langen Zeitschritt erlauben, aufgeführt.

In einer Arbeit von *Allen et al. (1991)* wird die Erweiterung eines eindimensionalen van Leer Schema (*van Leer 1974; 1977; 1979*), welches eine Klasse monotoner, stromaufwärts gerichteter Transportverfahren repräsentiert, für die Anwendung in einem dreidimensionalen Tracertransportmodell beschrieben. Die Lösung der eindimensionalen Advektionsgleichung (2.1) folgt einer Idee, die in Gleichung (2.7) konzeptionell zum Ausdruck kommt:

$$\phi^{\text{neu}} = \phi^{\text{alt}} - \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \{ (\text{Fluß})_{\text{rechts}} - (\text{Fluß})_{\text{links}} \}. \quad (2.7)$$

$\phi_{\text{neu}}$  und  $\phi_{\text{alt}}$  ist der neue bzw. alte Wert des Dichtefeldes im Zentrum der Gitterbox,  $\Delta t$  ist der verwendete Zeitschritt,  $\Delta \xi$  die Breite der Gitterzelle und  $(\text{Fluß})_{\text{rechts/links}}$  beschreibt die

zeitliche Rate des Massentransfers durch den rechten bzw. linken Rand von stromaufwärts gelegenen Gitterzellen ausgehend. Diese Rate wird bestimmt, indem man die Massendichte am Rand zu den Zeitpunkten  $t$  und  $t+\Delta t$  abschätzt und den zeitlichen Mittelwert mit der Advektionsgeschwindigkeit am Rand multipliziert. Die Abschätzung der Dichte am Rand erfolgt über eine stromaufwärts gerichtete Extrapolation der Steigung des Dichtefeldes. Die Bestimmung dieser Steigung kann dann so gewählt werden, daß man ein monotones Schema erhält (*van Leer 1977, 1979*). Die Anwendung auf eine dreidimensionale Tracertransportgleichung wird über eine unabhängige Berechnung der entsprechenden Terme in den drei verschiedenen Richtungen vollzogen. Obwohl bekannt ist, daß Richtungssplitting zusätzliche Fehlerquellen mit sich bringt, *Smolarkiewicz (1984)*, ist das Problem bei Verfahren des van Leer Typs bisher nicht bekannt. Ein geringer Phasenfehler und die Eigenschaft Tracerkorrelationen zu erhalten machen es attraktiv, ein Nachteil ist jedoch eine beträchtliche implizite Diffusion insbesondere bei niedriger Auflösung.

Die gleiche Idee wurde auch in einer Arbeit von *Lin et al. (1994)* aufgegriffen. Durch eine veränderte Bestimmung der Steigung des Dichtefeldes kann die strenge Monotoniebedingung durch die weniger strenge Positivitätsbedingung ersetzt werden, d.h. negative Werte werden zwar ausgeschlossen, ein Überschießen über das Maximum hinaus ist jedoch erlaubt. Weiterhin wird gezeigt, daß bei Verwendung einer globalen Begrenzung des Maximums der transportierten Eigenschaft, die Monotonie zwar lokal verletzt werden kann, aber die implizite Diffusion beträchtlich reduziert werden kann. Falls dies nicht ausreicht wird empfohlen ein Verfahren höherer Ordnung, *Colella und Woodward (1984)*, zur Bestimmung der Dichte an den Wänden der Gitterbox zu verwenden.

In den Arbeiten von *Lin und Rood (1996)* sowie *Leonard et al. (1996)* wird ein mehrdimensionales semi-Lagrange-Verfahren in Flußform-Formulierung vorgeschlagen. Traditionelle Operator-Splitting Techniken, wie sie auch bei den oben genannten Autoren verwendet werden, haben den Vorteil, daß sie automatisch einen transversalen Beitrag zu den Normalkomponenten der Flüsse einführen, der aus Stabilitätsgründen auch notwendig ist. Nimmt man für die Berechnung der eindimensionalen Beiträge Operatoren in advektiver Form an, lautet die Operatorform der Gleichung für den Zellmittelwert eines skalaren Feldes zum neuen Zeitpunkt  $\bar{\phi}_{ax}$ ,

$$\bar{\phi}_{ax} = (1 + X_a)(\bar{\phi}) \quad (2.8)$$

mit  $X_a(\bar{\phi}) = c_x^{\text{cell}} (\phi_w^{1D}(\bar{\phi}) - \phi_o^{1D}(\bar{\phi}))$ .  $\phi^{1D}$  ist jeweils der effektive eindimensionale Fluß des skalaren Feldes senkrecht durch die Seitefläche einer Gitterzelle. Für die Bezeichnung der Richtung wurde die übliche Kompassnotation benutzt.  $x$  bezeichnet die Koordinaten-

richtung und  $c$  die entsprechende Normalkomponente der Courantzahl. Der Index  $a$  steht für die advective Form des Operators. Addiert man dazu das Resultat, welches sich ergibt wenn man den entsprechenden Operator auf (2.8) in  $y$ -Richtung angewendet, so ist

$$\bar{\phi}_{axy}^{+} = (1 + X_a + Y_a + X_a Y_a)(\bar{\phi}^{-}) \quad (2.9)$$

die advective Form für das Operator-Splitting. Das Analogon zu (2.9) für die Operatoren in konservativer Flußform ist

$$\bar{\phi}_{kxy}^{+} = (1 + X_k + Y_k + X_k Y_k)(\bar{\phi}^{-}), \quad (2.10)$$

wobei diesmal aber  $X_k(\bar{\phi}^{-}) = c_{xw}\phi_w^{1D} - c_{xo}\phi_o^{1D}$  ist. Der wesentliche Unterschied zwischen advektiver Form und konservativer Flußform liegt in der Behandlung der Geschwindigkeiten, *Smolarkiewicz und Rasch (1991)*. In der konservativen Betrachtung sind die Geschwindigkeiten für die Seitenflächen einer Zelle individuell verschieden. In der advektiven Form beziehen sie sich jedoch auf das Zellvolumen, welches von den Seiten umschlossen wird. Nun läßt sich leicht überprüfen, daß mit der advektiven Form in einem solenoiden Strömungsfeld ein anfänglich homogenes skalares Feld auch in der Folge homogen bleibt, die Masse des skalaren Feldes ist jedoch nicht erhalten, *Leonard et al. (1996)*. Die konservative Form erfüllt hingegen genau die letzte Eigenschaft, verletzt aber die erste. Die oben genannten Autoren zeigen, daß eine Kombination der beiden Formulierungen beide Eigenschaften gleichzeitig erfüllen kann. Im ersten Schritt erfolgt die Berechnung des neuen Feldes in z.B.  $x$ -Richtung mittels des advektiven Operators  $X_A$ . Im zweiten Schritt wird auf das Ergebnis des ersten in  $y$ -Richtung der konservative Operator  $Y_C$  angewendet und bildet zusammen mit einem separaten konservativen Schritt in  $y$ -Richtung das neue skalare Feld  $\phi^+$ . Anstelle von (2.9) oder (2.10) ergibt sich dann,

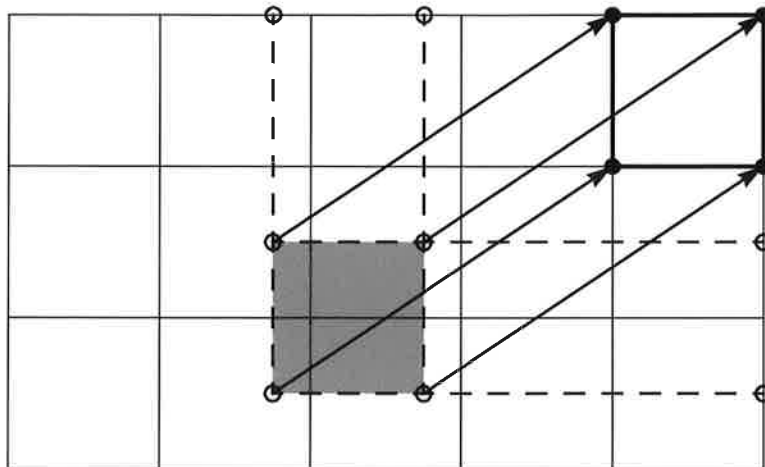
$$\bar{\phi}_{xy}^{+} = (1 + X_k + Y_k + Y_k X_a)(\bar{\phi}^{-}). \quad (2.11)$$

Kehrt man die Reihenfolge der Berechnungen um, erhält man

$$\bar{\phi}_{yx}^{+} = (1 + X_k + Y_k + X_k Y_a)(\bar{\phi}^{-}). \quad (2.12)$$

Der schließlich von *Leonard et al. (1996)* verwendete Algorithmus wechselt in jedem Zeitschritt zwischen (2.11) und (2.12) ab. Die zugrunde liegenden eindimensionalen Operatoren bauen auf den Arbeiten von *Allen (1991)* und *Lin et al. (1994)* auf. Ein weiteres Merkmal

ihrer Methode, die Verwendung von Zeitschritten jenseits des CFL-Stabilitätskriteriums, macht sie natürlich besonders effizient.



**Abb. 2.4** Interpretation des Algorithmus von Leonard für ein gleichförmiges Geschwindigkeitsfeld. Die schraffierte Fläche ist eine Gitterzelle die am Ende des Zeitschritts in der stark umrandeten Fläche endet.

Im Spezialfall gleichförmiger Geschwindigkeit zeigt Abb. 2.4 eine Interpretation des beschriebenen Verfahrens, nämlich eine Art Verschiebung von Gitterzellen entlang von trajektorienähnlichen Linien. Eine Erweiterung des Zeitschritts auf Werte jenseits des CFL-Kriteriums ist vergleichbar mit den Methoden von *LeVeque (1985)*, *Roache (1992)* und *Leonard (1994)* für eindimensionale Fragestellungen. Sie hat konzeptionelle Ähnlichkeiten mit nicht interpolierenden semi-Lagrange-Methoden der Trajektorienbestimmung *Ritchie (1986)* und *Smolarkiewicz und Rasch (1991)* und baut auf einer Verschiebung des Signals um eine ganzzahlige Anzahl von Gitterboxen gefolgt von einer Verschiebung um den Bruchteil einer Maschenweite, die mittels eines Euler-Verfahrens berechnet wird.

Eine sehr genaues und wenig diffusives Advektionsverfahren, das auf der Erhaltung von Momenten zweiter Ordnung basiert ist bei *Prather (1986)* beschrieben. Allerdings besteht ein gravierender Nachteil darin, daß diese Methode sehr teuer ist und so eine Anwendung in umfangreichen Modellen ineffektiv wird. Für Einzelstudien ist dieses Verfahren hingegen gut geeignet.

### 2.3 Volumenorientierte konservative Methoden

Die letzte Klasse konservativer semi-Lagrange-Methoden die hier vorgestellt wird ist in einer Arbeit von *Laprise und Plante (1995)* umrissen worden. Es handelt sich dabei um sogenannte Massen-Integral Methoden. Die Idee ist schon in *Hirt et al. (1974)* für die

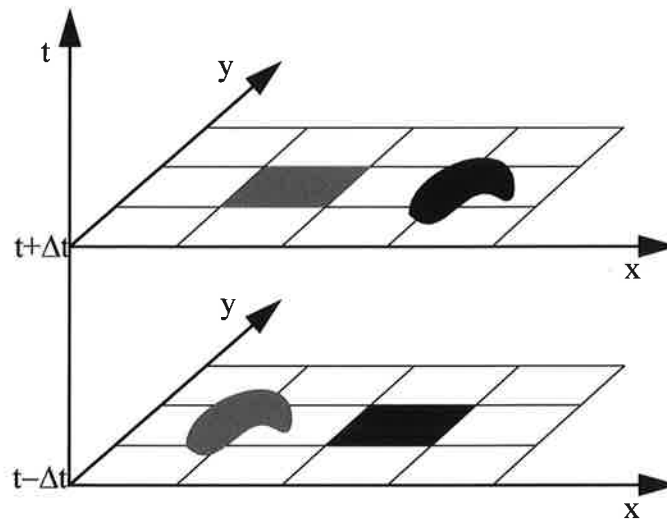
Navier-Stokes Gleichung in allgemeinen hydrodynamischen Anwendungen entwickelt worden. Das dabei benutzte Zeitschrittverfahren ist wahlweise ein Euler- oder Lagrange-Verfahren (nicht semi-Lagrange!). Ein wesentliches Merkmal dieser Idee ist die Diskretisierung der Gleichungen in integraler Form anstatt in der meistens benutzten differentiellen Form. Die Integralform ist eigentlich auch die naheliegende Form, da die Erhaltungseigenschaft der jeweils betrachteten Größen auf einem Integralprinzip basiert. Wie in *Laprise und Plante (1995)* gezeigt, läßt sich aus der Flußform der Kontinuitätsgleichung mit Hilfe der totalen Ableitung unter Ausnutzung der Leibnitz-Regel die Integro-Differentialform der Kontinuitätsgleichung herleiten anhand der die Eleganz dieses Ansatzes deutlich wird. In einer Dimension unter Vernachlässigung von Quellen und Senken lautet sie

$$\frac{d}{dt} \int_{A(t)}^{B(t)} \phi(\xi, t) d\xi = 0, \quad (2.13)$$

wobei  $\phi(\xi, t)$  die Konzentration eines beliebigen Stoffes ist.  $A(t)$  bzw.  $B(t)$  sind die mit der Strömung mitgeführten Integrationsgrenzen, die oftmals auch als die Seitenflächen oder Membranen einer Gitterzelle interpretiert werden. Da (2.13) die Form einer totalen Ableitung hat, eignet sie sich besonders zur Lösung mittels eines semi-Lagrangischen Verfahrens. Je nach Wahl der Zellmembranen kann man ein stromaufwärts oder stromabwärts gerichtetes Schema entwickeln. Die Interpretation dieser zwei Ansätze wird in Abb. 2.5 deutlich. Bildhaft gesprochen kann man sich das stromaufwärtsgerichtete Verfahren so vorstellen, daß man ein Fischnetz stromaufwärts auswirft um die Masse heranzuholen, die vom Volumen des Netzes umschlossen wird und die  $2\Delta t$  später genau eine Box des regulären Gitters füllt. Das stromabwärts gerichtete Verfahren ist in etwa äquivalent zu der Vorstellung, daß Staub, welcher anfangs in kleinen Eimern vorhanden ist, in den Wind gestreut wird und man beobachtet wie er zwei Zeitschritte später in verschiedene Eimer niederfällt.

Rechnerisch zerfällt die erste Version in zwei Teilschritte: Zum einen in die Darstellung der Dichteverteilung innerhalb der Gitterboxen mittels einer geeigneten Funktion und zweitens in eine konservative Abbildung des regelmäßigen Gitters auf das unregelmäßige, d.h. eine Integration der Dichteverteilung über die Gitterzellen des unregelmäßigen Gitters.

Als Ergebnis der Experimente von *Laprise und Plante (1995)* kann man festhalten, daß die Idee der volumenorientierten konservativen Methoden sowohl als stromaufwärts Verfahren als auch als stromabwärts Verfahren umgesetzt werden kann.



**Abb. 2.5** Figur 1 aus Laprise und Plante (1995). Die schwarz schattierten Flächen zeigen die Situation für den Fall eines stromabwärts gerichteten Verfahrens, die heller schattierten Flächen für ein stromaufwärts Verfahren.

Die Eigenschaften dieser Methode sind denen klassischer Verfahren ähnlich, mit dem zusätzlichen Bonus der Massenerhaltung. Der Rechenaufwand ist gegenüber klassischen Methoden zwar etwas höher muß aber gegenüber dem Vorteil der Massenerhaltung abgewogen werden.

Unabhängig von der Arbeit von *Laprise und Plante (1995)* wurde das stromaufwärtsgerichtete semi-Lagrangische Integrationsverfahren von *Machenhauer (1994)* entwickelt, welches dann später als semi-Lagrangisches Zellintegrationsverfahren (SLZI) bezeichnet wurde. *Machenhauer (1994)* hat gezeigt, daß es mit dieser Methode möglich ist einen vollständigen Gleichungssatz aufzustellen, der die Gesamtmasse, Gesamtenergie und Gesamtdrehimpuls der Atmosphäre erhält. Diese Idee wurde auf einem Workshop über semi-Lagrange Methoden präsentiert, der im Oktober 1992 am Max-Planck-Institut für Meteorologie stattgefunden hat. Dort wurden von *Ritchie (1994)* auch erste Ergebnisse der Arbeit von *Plante (1993)* vorgestellt. In diesem Zusammenhang müssen auch die Experimente von *Rancic (1992)* erwähnt werden, der ebenfalls mit dem SLZI Schema arbeitete, welches er unabhängig entwickelt und auf zweidimensionale, horizontale Advektion eines passiven Skalars in kartesischen Koordinaten angewandt hat.



### 3. Die Zellintegrationsmethode in einer Dimension

In diesem Kapitel sollen die wichtigsten Merkmale der Zellintegrationsmethode anhand einfacher, eindimensionaler Beispiele erläutert werden. Die Beschäftigung mit eindimensionalen Beispielen erscheint vor allen Dingen aus den folgenden zwei Gründen sinnvoll: Zum einen ist es eine übliche Vorgehensweise bei der Entwicklung eines neuen numerischen Verfahrens dieses zunächst an einfachen Problemen zu studieren, damit eventuelle Schwierigkeiten besser erkannt werden können und die Brauchbarkeit der Methode schon frühzeitig eingeschätzt werden kann. Zum anderen, soviel sei vorweggenommen, sind Integrationen in einer Dimension auch elementare Bausteine des Verfahrens in mehreren Dimensionen.

#### 3.1 Die grundlegende Idee

Folgt man *Machenhauer (1994)*, so betrachtet man zunächst die Kontinuitätsgleichung für eine passive, skalare Größe in Eulerscher Formulierung,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(\xi, t) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\phi(\xi, t) \cdot u(\xi, t)) = 0 \quad (3.1)$$

$\xi$  ist die Ortskoordinate,  $t$  die Zeit,  $u$  die Geschwindigkeitskomponente in  $\xi$ -Richtung und  $\phi$  die Konzentration oder Dichte der zu transportierenden Eigenschaft. Da es sich hier um ein 1D-Problem handelt, ist die Einheit von  $\phi$  kg/m. Dividiert man  $\phi$  durch die Dichte der Luft erhält man die massenspezifische Konzentration der betreffenden Größe. Handelt es sich bei  $\phi$  z.B. um die Konzentration von Wasserdampf, nennt man die entsprechende massenspezifische Größe, spezifische Feuchte  $q$ . Aus (3.1) ergibt sich nach einer kleinen Umformung

$$\frac{d}{dt} \phi(\xi, t) = -\phi(\xi, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} u(\xi, t). \quad (3.2)$$

Setzt man in diese den Eulerschen Ausdruck der Divergenz

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = \frac{1}{\delta \xi} \frac{d}{dt} (\delta \xi) \quad (3.3)$$

ein, so erhält man schließlich die folgende Fassung der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{d}{dt} (\phi \delta \xi) = 0 \quad (3.4)$$

wobei  $\delta\xi$  ein infinitesimal kleines Längenintervall bedeutet. (3.4) ist die differentielle Form des Integralprinzips, daß die Gesamtmasse eines Skalars in einem Gebiet bei Wahl entsprechender Randbedingungen zeitlich konstant bleibt. Für die weitere Betrachtung ist die Integral-Differential-Form der Kontinuitätsgleichung sehr hilfreich. Zur Herleitung integriert man (3.1) zwischen zwei Grenzen  $A(\xi, t)$  und  $B(\xi, t)$ , die mit der Strömung mitgeführt werden d.h.,

$$\frac{d}{dt} A(\xi, t) = u(A(\xi, t), t) \quad , \quad \frac{d}{dt} B(\xi, t) = u(B(\xi, t), t) \quad . \quad (3.5)$$

Unter Anwendung der Leibnitzregel erhält man schließlich

$$\frac{d}{dt} \int_{A(\xi, t)}^{B(\xi, t)} \phi(\xi', t) d\xi' = 0 \quad . \quad (3.6)$$

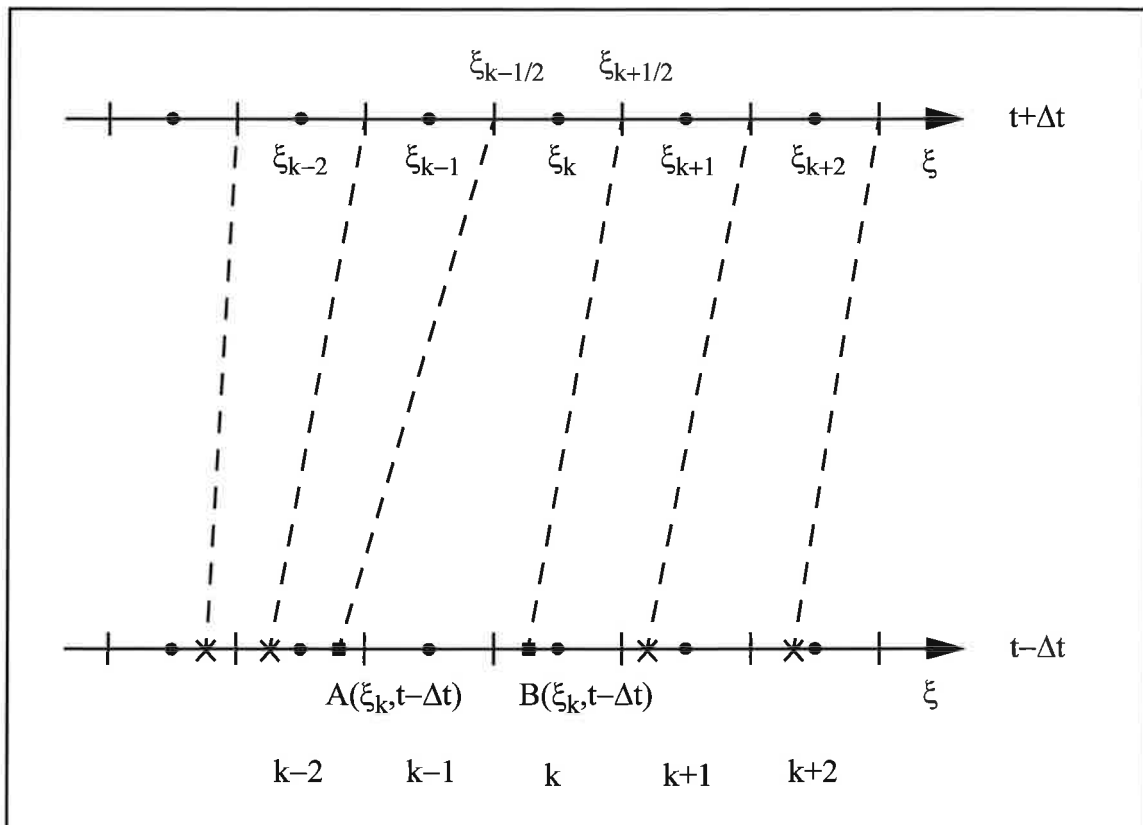
Gleichung (3.6) hat nun zwei besondere Merkmale: Ihr liegt ein Integralprinzip zugrunde und sie enthält eine totale Ableitung, wodurch sie sich besonders für die Behandlung mit semi-Lagrangischen Methoden eignet. Da (3.5) eine Trajektoriengleichung ist lassen sich A und B leicht als Anfangspunkte von Trajektorien interpretieren. In Abb. 3.1 ist dies veranschaulicht. Gleichung (3.6) ist mit (2.13) nahezu identisch, (3.6) ist allerdings formal genauer, da die Integrationsgrenzen im allgemeinen von der Zeit und vom Ort abhängen.

Sei nun ein eindimensionales, äquidistantes Gitter der Gitterweite  $\Delta\xi$  und den K Gitterpunkten  $\xi_k = k\Delta\xi$ ,  $k=1, \dots, K$  gegeben. In der Mitte zwischen zwei Punkten befinden sich die sogenannten Zellwände oder Zellmembranen, deren Ortskoordinaten mit halbzahligen Indizes versehen sind, d.h.  $\Delta\xi_k = \xi_{k+1/2} - \xi_{k-1/2}$ . Der Wert von  $\phi$  am Gitterpunkt  $\xi_k$  zum Zeitpunkt  $t = n\Delta t$  wird mit  $\phi_k^n$  bezeichnet, es ist also  $\phi_k^n = \phi(k\Delta\xi, n\Delta t)$ . Ist nur die räumliche Diskretisierung relevant, wird auch die Notation  $\phi_k(t) = \phi(k\Delta\xi, t)$  benutzt. Gitterpunktwerte  $\phi_k^n$  repräsentieren in diesem Verfahren den Mittelwert der Konzentration  $\phi(\xi, t)$  in Zelle k, d.h.

$$\phi_k^n = \frac{1}{\Delta\xi_k} \int_{\xi_{k-1/2}}^{\xi_{k+1/2}} \phi(\xi, t) d\xi \quad . \quad (3.7)$$

Ist nun  $\phi_k(t - \Delta t)$  bekannt, läßt sich mit Hilfe von (3.6) die neue Verteilung zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  bestimmen.

Zunächst konstruiert man für jede Gitterzelle  $k$  Trajektorien, die an den Zellwänden enden und deren Anfangspunkte ein unregelmäßiges Gitter zum Zeitpunkt  $t-\Delta t$  bilden. Dem Beispiel in Abb. 3.1 ist zu entnehmen, daß die Trajektorie A, welche die linke Wand von Gitterzelle  $k$  bildet, zum Zeitpunkt  $t-\Delta t$  in Zelle  $k-2$  beginnt und B, die entsprechende rechte Wand, in Zelle  $k$  startet. Aus (3.6.) ergibt sich dann,



**Abb. 3.1** Erklärung der verwendeten Notation am Beispiel des semi-Lagrangischen Drei-Schritt-Verfahrens in einer Dimension. Die zwei Achsen stellen jeweils die Raumkoordinate zu den zwei verschiedenen Zeitpunkten dar. Die ausgefüllten Kreise sind die Gitterpunkte des regelmäßigen Gitters, die jeweiligen Ortskoordinaten tragen ganzzahlige Indizes. Die sogenannten Zellwände sind als kurze, senkrechte Linien an den Achsen eingezeichnet, deren Ortskoordinaten tragen halbzahlige Indizes. Die gestrichelten Linien sind Trajektorien mit Kreuzen als Anfangspunkte. Für die Gitterbox  $k$  sind die entsprechenden Anfangspunkte der Trajektorien von linker bzw. rechter Zellwand mit A bzw. B bezeichnet und als ausgefüllte Quadrate dargestellt. Schließlich ist unterhalb der Figur die Indizierung der Gitterboxen zu sehen.

$$\int_{\xi_{k-1/2}}^{\xi_{k+1/2}} \phi(\xi_k, t + \Delta t) d\xi = \int_{A(\xi_k, t-\Delta t)}^{B(\xi_k, t-\Delta t)} \phi(\xi_k, t-\Delta t) d\xi . \quad (3.8)$$

Hierbei wurde benutzt, daß für die Endpunkte der Trajektorien gilt:  $A(\xi_k, t+\Delta t) = \xi_{k-1/2}$  und  $B(\xi_k, t+\Delta t) = \xi_{k+1/2}$ . Für das in Abb. 3.1 gezeigte Beispiel läßt sich die rechte Seite von (3.8) weiter aufspalten und man erhält

$$\int_{\xi_{k-1/2}}^{\xi_{k+1/2}} \phi(\xi, t + \Delta t) d\xi = \int_{A(\xi_k, t-\Delta t)}^{\xi_{k-3/2}} \phi_{k-2}(t-\Delta t) d\xi + \int_{\xi_{k-3/2}}^{\xi_{k-1/2}} \phi_{k-1}(t-\Delta t) d\xi + \int_{\xi_{k-1/2}}^{B(\xi_k, t-\Delta t)} \phi_k(t-\Delta t) d\xi \quad (3.9)$$

Nach Auswertung einiger Integrale verbleibt

$$\Delta \xi \cdot \phi_k^{n+1} = \int_{A(\xi_k, t-\Delta t)}^{\xi_{k-3/2}} \phi_{k-2}(t-\Delta t) d\xi + \Delta \xi \cdot \phi_k^{n-1} + \int_{\xi_{k-1/2}}^{B(\xi_k, t-\Delta t)} \phi_k(t-\Delta t) d\xi . \quad (3.10)$$

Die weitere Auswertung von (3.10) hängt nun davon ab, wie die Konzentration  $\phi(\xi, t)$  parametrisiert wird. Zunächst sei nur verlangt, daß  $\phi(\xi, t)$  Gleichung (3.7) erfüllt und stückweise stetig ist, in dem Sinne, daß  $\phi$  stetig in jeder Gitterzelle ist. Ist diese Funktion gefunden, stellt sich die rechte Seite von Gleichung (3.9) im allgemeinen Fall als Summe von Integralen stückweise analytisch integrierbarer Funktionen dar. Im gezeigten Beispiel besteht die Summe aus drei Summanden, sonst hängt die genaue Anzahl im allgemeinen davon ab, wie viele Gitterzellen ganz oder teilweise zwischen den Positionen von A und B liegen. Der Wert von  $\phi_k$  zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  läßt sich also als eine Art gewichtetes Mittel über eine Anzahl  $n = n(k)$  Werte  $\phi_i$  zum Zeitpunkt  $t - \Delta t$  interpretieren.

Die Erhaltung der Gesamtmasse eines Skalars  $\phi$  läßt sich aus den bisher gemachten Erläuterungen nun wie folgt erkennen. Summiert man (3.8) über alle  $k$  erhält man:

$$\sum_{k=1}^K \int_{\xi_{k-1/2}}^{\xi_{k+1/2}} \phi_k(t + \Delta t) d\xi = \sum_{k=1}^K \int_{A(\xi_k, t-\Delta t)}^{B(\xi_k, t-\Delta t)} \phi_k(t-\Delta t) d\xi . \quad (3.11)$$

Die linke Seite von (3.11) liefert wegen (3.7),

$$LS = \sum_{k=1}^K \Delta \xi_k \phi_k^{n+1}. \quad (3.12)$$

Aus der rechten Seite erhält man wegen

$$B(\xi_k, t - \Delta t) = A(\xi_{k+1}, t - \Delta t) \quad (3.13)$$

$$RS = \int_{A(\xi_1, t-\Delta t)}^{\xi_{j-1/2}} \phi_j(\xi, t-\Delta t) d\xi + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \Delta \xi_k \phi_k^{n-1} + \int_{\xi_{j-1/2}}^{B(\xi_K, t-\Delta t)} \phi_j(\xi, t-\Delta t) d\xi \quad (3.14)$$

wobei die Anfangspunkte  $A(\xi_1, t - \Delta t)$  und  $B(\xi_K, t - \Delta t)$  in der Gitterbox  $j$  liegen sollen. Unter der Annahme periodischer Randbedingungen, d.h.

$$A(\xi_1, t - \Delta t) = B(\xi_K, t - \Delta t) \quad (3.15)$$

sowie (3.11), (3.12) und (3.14) erhält man schließlich

$$\sum_{k=1}^K \Delta \xi_k \phi_k^{n+1} = \sum_{k=1}^K \Delta \xi_k \phi_k^{n-1}, \quad (3.16)$$

d.h. die Gesamtmasse von  $\phi$  in einem geschlossenen Gebiet ist zeitlich konstant. Die Wahl der periodischen Randbedingung macht das Integrationsgebiet geschlossen.

Bisher besteht das SLZI-Verfahren aus einer konservativen Abbildung von einem unregelmäßigen Gitter, welches durch die Anfangspunkte der Trajektorien gebildet wird, auf ein regelmäßiges Gitter. Es bleibt festzuhalten, daß bislang keine Bedingungen an  $\phi(\xi, t)$  gestellt wurden mit Ausnahme von (3.7). In den folgenden Kapiteln wird die Auswahl einer geeigneten Funktionen näher betrachtet und unter Umständen notwendige, weitere Einschränkungen diskutiert.

### 3.2 Stückweise konstante Funktionen

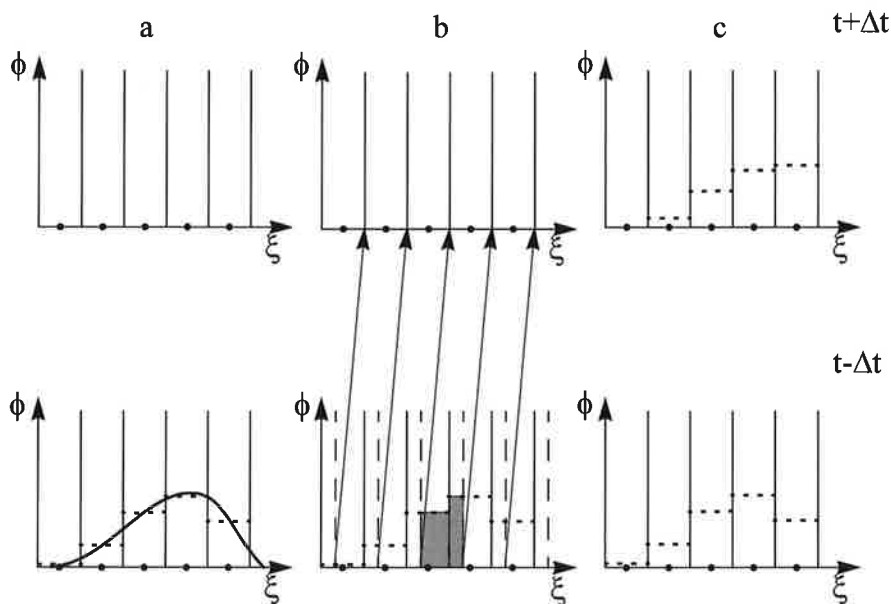
Die einfachste Funktion, die man für  $\phi(\xi, t)$  auswählen kann, ist eine räumlich konstante Funktion, d.h. überall in einer Gitterbox  $k$  nimmt  $\phi$  den gleichen Wert an. Damit (3.7) erfüllt ist muß demnach gelten,

$$\phi(\xi_k, t) = \phi_k^n. \quad (3.17)$$

Mit dieser Wahl läßt sich (3.10) weiter konkretisieren,

$$\begin{aligned}
 \Delta\xi \cdot \phi_k^{n+1} &= (\xi_{k-\frac{3}{2}} - A(\xi_k, t - \Delta t)) \cdot \phi_{k-2}^{n-1} \\
 &+ \Delta\xi \phi_{k-1}^{n-1} \\
 &+ (B(\xi_k, t - \Delta t) - \xi_{k-\frac{1}{2}}) \cdot \phi_{k-2}^{n-1}
 \end{aligned}
 \tag{3.18}$$

Die Faktoren im ersten bzw. dritten Term von (3.18) hängen nur noch von den Anfangspunkten der Trajektorien A bzw. B und damit von der vorherrschenden Strömung ab.



**Abb. 3.2** Hier wird der Ablauf des Transports mittels der Zellintegrationsmethode dargestellt. Die senkrechten Linien in jedem Bild sind die Wände der Gitterboxen und die gestrichelten, horizontalen Linien sind die Zellmittelwerte.

In Abb. 3.2 ist zu sehen, wie der Transport eines Signals mittels Zellintegrationsmethode abläuft. Zunächst werden aus einer Anfangsverteilung (durchgezogene Kurve) Boxmittelwerte, im Bild durch gepunktete Linien dargestellt, ermittelt. Wenn diese Verteilung analytisch bekannt ist, kann man die Mittelwerte berechnen, andernfalls werden die Gitterpunktwerte als Startwerte angenommen. Dieser Schritt ist im Teilbild (a) illustriert und wird nur einmal, zu Beginn der Berechnungen durchgeführt. Im zweiten Teilbild ist nun der Transport mit konstanter Geschwindigkeit dargestellt. Die Zellwände, die zu den entsprechenden Anfangs- und Endpunkten der Trajektorien gehören, werden während der

Zeitspanne  $2\Delta t$  mit einer Courantzahl von ungefähr  $1/3$  nach rechts transportiert. Die neuen Zellmittelwerte erhält man nun durch Integration der stückweise konstanten Funktion über den entsprechenden Abschnitt zum Zeitpunkt  $t - \Delta t$ . Im Bild ist diese Integration exemplarisch für eine Gitterbox durch die schraffierte Fläche angedeutet. In Teilbild (c) sieht man nun die neuen Zellmittelwerte am Ende des Zeitschritts, die zugleich die Startwerte für den übernächsten Zeitschritt darstellen. Die Wahl eines Drei-Schritt-Verfahrens ist für dieses Beispiel zwar nicht notwendig, wird aber beibehalten, da dies in der ursprünglichen Konzeption eine Rolle spielte.

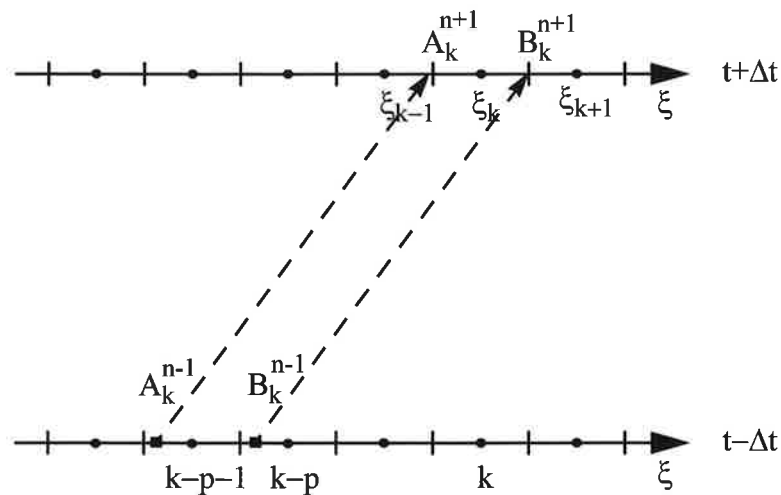


Abb. 3.3 Notation für das SLZI-Verfahren im Fall eines konstanten Windfeldes. Die ausgefüllten Quadrate stellen die Startpunkte der Trajektorien dar und die gestrichelten Linien sind die Trajektorien selbst.

Im Falle eines konstanten Windfeldes läßt sich recht einfach zeigen, daß das SLZI-Verfahren mit konstanten Funktionen äquivalent zur klassischen "Forward-Upstream-Methode" ist. Dazu soll die in Abb. 3.3 festgelegte Notation verwendet werden: Die konstante Strömung  $u$  (hier sei  $u > 0$ ) transportiert die Gitterbox  $k$  während der Zeitspanne  $2\Delta t$  entlang den gestrichelt dargestellten Trajektorien. Das Intervall, in welches der Startpunkt der rechten Boxgrenze fällt, liege  $p$  Intervalle stromaufwärts von der Box, deren rechte Grenze der Endpunkt  $B_k^{n+1}$  ist. In Analogie zu (3.18) ergibt sich für  $\phi_k^n$ ,

$$\begin{aligned} \Delta\xi \cdot \phi_k^{n+1} &= ((k-p-\frac{1}{2})\Delta\xi - A(\xi_k, t-\Delta t)) \cdot \phi_{k-p-1}^{n-1} \\ &+ (B(\xi_k, t-\Delta t) - (k-p-\frac{1}{2})\Delta\xi) \cdot \phi_{k-p}^{n-1} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Bestimmt man die Startpunkte der Trajektorien mit dem in Kapitel 2 beschriebenen Verfahren, so ergibt sich,

$$\phi_k^{n+1} = (1 - \hat{\alpha})\phi_{k-p}^{n-1} + \hat{\alpha}\phi_{k-p-1}^{n-1} \quad (3.20)$$

mit

$$\hat{\alpha} = 2\alpha - p \quad (3.21)$$

und analog zu (2.3)

$$\alpha = \frac{\Delta t u}{\Delta \xi} \quad (3.22)$$

Eine Umformung von (3.20) zu

$$\phi_k^{n+1} = \phi_{k-p}^{n-1} + \hat{\alpha}(\phi_{k-p-1}^{n-1} - \phi_{k-p}^{n-1}) \quad (3.23)$$

läßt die formale Äquivalenz zu einem Eulerschen "Forward-Upstream-Verfahren" sofort klar werden. Mit  $p=0$  und daraus folgend  $\hat{\alpha} = \alpha$  lautet (3.23) nämlich

$$\phi_k^{n+1} = \phi_k^{n-1} + 2\Delta t \frac{\phi_k^{n-1} - \phi_{k-1}^{n-1}}{\Delta \xi}, \quad (3.24)$$

womit die Äquivalenz bewiesen wäre. Aus (3.20) erkennt man weiterhin die formale Gleichheit zur semi-Lagrange-Methode mittels linearer Interpolation. Wie weiter unten noch zu sehen sein wird, besitzt das SLZI-Verfahren mit konstanten Funktionen auch ähnliche Eigenschaften wie das "Forward-Upstream-Verfahren".

### 3.3 Stückweise lineare Funktionen

Die Repräsentation der Verteilung mittels konstanter Funktionen ist sehr einfach und es ist zu erwarten, daß eine Funktion, die eine Variation innerhalb einer Box zuläßt, besser geeignet ist. So erreicht *van Leer (1979)* eine formale Genauigkeit zweiter Ordnung indem er eine lineare Verteilung der in seiner Arbeit betrachteten Größen annimmt, d.h.



$$\phi(\xi_k) = a(\xi_k) + b(\xi_k) \cdot x \quad (3.25)$$

wobei

$$x = \frac{\xi - \xi_{k-1/2}}{\Delta\xi}, \quad \xi_{k-1/2} \leq \xi \leq \xi_{k+1/2} \quad (3.26)$$

eine lokale, mit der Länge der Gitterbox normierte Ortskoordinate ist. Die Koeffizienten müssen wiederum (3.7) erfüllen. Ersetzt man  $\xi$  in (3.7) durch  $x$ , so erhält man

$$\phi_k^n = \int_0^1 (a_k + b_k \cdot x) dx \quad (3.27)$$

bzw. 
$$a_k + \frac{1}{2}b_k = \phi_k^n \quad (3.28)$$

Als zweite Bedingung zur Bestimmung der Koeffizienten kann man ausnutzen, daß die Steigung  $\Delta\phi_k$  innerhalb der Zelle gleich der Differenz der Funktionswerte am rechten und linken Rand ist, also

$$\Delta\phi_k = \phi(\xi_{k+1/2}) - \phi(\xi_{k-1/2}) = b_k \cdot \Delta\xi \quad (3.29)$$

Mit (3.28) und (3.29) sind die Koeffizienten eindeutig festgelegt und es ist:

$$b_k = \Delta\phi_k / \Delta\xi \quad (3.30a)$$

$$a_k = \phi_k^n - \frac{1}{2}\Delta\phi_k \cdot \Delta\xi \quad (3.30b)$$

Die Koeffizienten  $a_k$  und  $b_k$  können demnach allein aus Boxmittelwerten und Steigungen bestimmt werden. Die Steigungen wiederum lassen sich z.B. als zentrale Differenzen ausrechnen

$$\Delta\phi_k = \frac{1}{2}(\phi_{k+1}^n - \phi_{k-1}^n) \cdot \Delta\xi \quad (3.31)$$

Fordert man zusätzlich, daß die Lösung keine neuen Extrema produzieren soll, also monoton ist, muß die Berechnung der Steigung modifiziert werden. Die Monotoniebedingung verlangt, daß die Verteilung der betrachteten Größe nur innerhalb des Bereichs liegen darf, der durch die Mittelwerte der Zelle selbst und ihrer beiden Nachbarzellen aufgespannt wird. Man kann dies dadurch erreichen, indem man die kleinste von drei Steigungen auswählt: Die Steigung aus zentralen Differenzen (3.31) und die rechts- bzw. linksseitigen Steigungen

gen. Wenn der Zellmittelwert ein Extremwert ist, sei die Steigung Null. Zusammenfassend läßt sich die Monotoniebedingung durch

$$\Delta\phi_k^{\text{mono}} = \begin{cases} \text{MIN} (|\Delta\phi_k|, 2|\phi_{k+1} - \phi_k|, 2|\phi_k - \phi_{k-1}|) \cdot \text{sign}(\Delta\phi_k) & \text{für } (\phi_{k+1} - \phi_k)(\phi_k - \phi_{k-1}) > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.32)$$

ausdrücken. Diese Bedingung wird auch bei *Collela und Woodward (1984)* und *Carpenter et. al (1990)* benutzt. In Abb. 3.4 ist Bedingung (3.32) graphisch dargestellt.

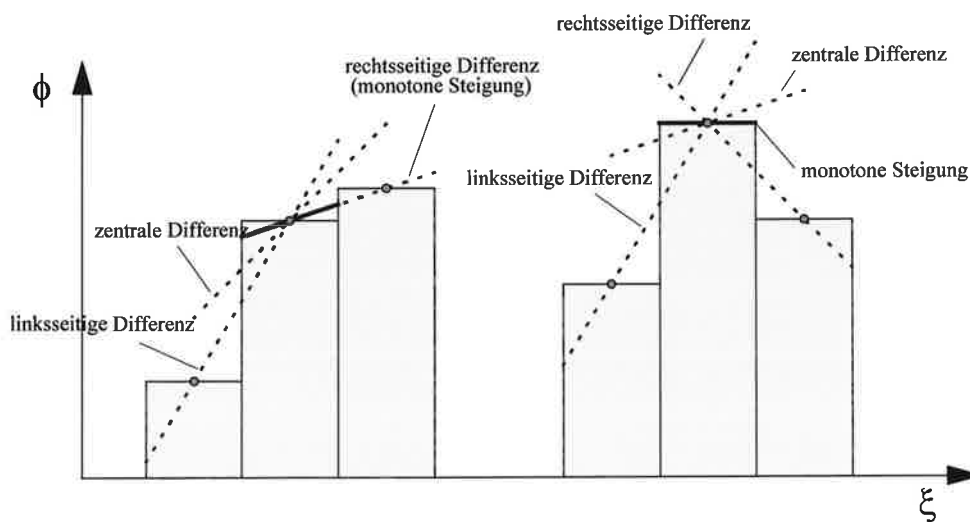


Abb. 3.4 Illustration der monotonen Steigung (in Anlehnung an Fig.2 in Carpenter et. al (1990)).

Möchte man keine strenge Monotonie, sondern lediglich eine positiv definite Lösung, läßt sich das durch eine schwächere Bedingung als (3.32) erreichen. Man nimmt wieder zentrale Differenzen als Steigung, begrenzt diese aber mit dem doppelten des Boxmittelwertes, d.h.

$$\Delta\phi_k^{\text{pos}} = \text{sign}(\Delta\phi_k) \cdot \text{MIN}(|\Delta\phi_k|, 2\phi_k). \quad (3.33)$$

### 3.4 Stückweise quadratische Funktionen

Verwendet man anstelle der linearen Funktion ein Polynom höherer Ordnung steigt der Aufwand zur Bestimmung der Koeffizienten schnell an. Ein Kompromiß zwischen verbesserten Ergebnissen und Rechenaufwand sind stückweise quadratische Funktionen. Diese Methode ist in der Astrophysik entwickelt worden und im Laufe der Zeit auch auf meteoro-

logische Fragestellungen erweitert worden, *Collela und Woodward (1984)*, *Carpenter et. al (1990)*, *Rancic (1992)* und *Rancic (1995)*.

Bei dieser Wahl approximiert man  $\phi(\xi_k)$  durch ein Polynom zweiter Ordnung

$$\phi(\xi_k) = a(\xi_k) + b(\xi_k) \cdot x + c(\xi_k) \cdot x^2, \quad (3.34)$$

wobei  $x$  wieder durch (3.26) festgelegt ist. Für die Bestimmung der Koeffizienten braucht man diesmal drei Bedingungen. Das Integral über  $\phi(\xi_k)$  über die gesamte Zelle liefert wegen (3.7)

$$a_k + \frac{1}{2}b_k + \frac{1}{3}c_k = \phi_k^n. \quad (3.35)$$

Weiterhin sollen die Werte am linken ( $x=0$ ) bzw. rechten ( $x=1$ ) Rand der Zelle bekannt sein, dann ergibt sich aus (3.34)

$$a_k = \phi_{k-1/2} \quad (3.36)$$

$$a_k + b_k + c_k = \phi_{k+1/2}. \quad (3.37)$$

Aus (3.35)-(3.37) erhält man schließlich

$$c_k = 3(\phi_{k+1/2} + \phi_{k-1/2}) - 6\phi_k \quad (3.38a)$$

$$b_k = (\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}) - c_k \quad (3.38b)$$

$$a_k = \phi_{k-1/2}. \quad (3.38c)$$

Damit reduziert sich die Bestimmung der Koeffizienten auf eine genaue Berechnung der Funktionswerte an den Rändern. Nach *Collela und Woodward (1984)* ergibt sich insgesamt ein Verfahren 4. Ordnung, wenn man

$$\phi_{k+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{k+1} + \phi_k) - \frac{1}{6}(\Delta\phi_{k+1} - \Delta\phi_k) \quad (3.39)$$

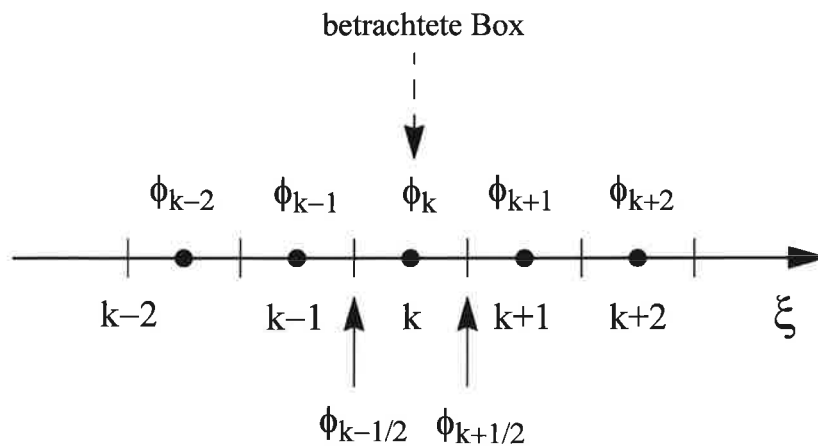
bzw. mit (3.31)

$$\phi_{k+1/2} = \frac{7}{12}(\phi_{k+1} + \phi_k) - \frac{1}{12}(\phi_{k+2} + \phi_{k-1}) \quad (3.40)$$

benutzt. Die Herleitung von (3.39) findet sich im Anhang A. Insgesamt braucht man also fünf Boxmittelwerte, um die Koeffizienten einer Parabel zu bestimmen. Dies ist in Abb. 3.5 skizziert. Wählt man für die Steigungen in (3.39) monotone Steigungen, dann ist garantiert,

daß die Randwerte  $\phi_{k+1/2}$  in dem von  $\phi_k$  und  $\phi_{k+1}$  aufgespannten Bereich liegen. Wenn die Randwerte nicht weiter verändert werden, sind die Polynome aus (3.34) in je zwei benachbarten Zellen am gemeinsamen Rand stetig. Bei den so konstruierten Parabeln kann jedoch der Fall auftreten, daß nicht alle Funktionswerte zwischen  $\phi_{k-1/2}$  und  $\phi_{k+1/2}$  liegen. Zum einen besteht die Möglichkeit, daß der Boxmittelwert selbst ein lokales Extremum bildet, dann wird die Funktion als konstant angesehen. Zum zweiten kann  $\phi_k$  genügend nahe an  $\phi_{k-1/2}$  bzw.  $\phi_{k+1/2}$  liegen, so daß ebenfalls einige Funktionswerte innerhalb der Box über bzw. unter den Randwerten liegen. Im Anhang B wird gezeigt, das dafür gelten muß:

$$|\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}| < |c_k|. \quad (3.41)$$



**Abb. 3.5** Um die Parabel der Gitterbox  $k$  zu berechnen werden fünf Boxmittelwerte benötigt, dies sind  $\phi_{k-2}, \phi_{k-1}, \dots, \phi_{k+2}$ . Dies ergibt sich aus der Tatsache, daß für die Berechnung der Randwerte  $\phi_{k-1/2}$  und  $\phi_{k+1/2}$  jeweils vier Mittelwerte gebraucht werden, von denen drei übereinstimmen.

Dann kann man durch eine Veränderung der Randwerte eine Funktion bilden, die wieder monoton ist. Die Veränderung erfolgt derart, daß die Steigung am jeweils anderen Randpunkt Null ist. Mathematisch lassen sich die Fälle folgendermaßen zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \phi_{k-1/2} &= \phi_{k+1/2} = \phi_k & , \text{ falls } & (\phi_{k+1/2} - \phi_k)(\phi_k - \phi_{k-1/2}) \leq 0 \\ \phi_{k-1/2} &= 3\phi_k - 2\phi_{k+1/2} & , \text{ falls } & -(\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}) c_k > (\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2})^2 \\ \phi_{k+1/2} &= 3\phi_k - 2\phi_{k-1/2} & , \text{ falls } & (\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}) c_k < (\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2})^2 \end{aligned} \quad (3.42)$$

Die beiden letzten Fälle bedeuten bildlich gesprochen, das der Extremwert zunächst innerhalb der Gitterbox liegt und durch die Neuberechnung der Randwerte auf den jeweils gegenüberliegenden Rand verschoben wird. Es ist auch, wie im Fall der linearen Funktio-

nen möglich, eine positiv definite Lösung zu konstruieren. Dazu muß überprüft werden, ob das Minimum der Funktion innerhalb der Gitterbox liegt **und** ob es negativ ist. Dann läßt sich analog zu (3.42) eine Bedingung für eine positiv definite Lösung formulieren:

$$\text{Wenn } |\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}| < c_k \text{ und } \phi_{\min} < 0$$

$$\begin{aligned} \phi_{k-1/2} = \phi_{k+1/2} = \phi_k & \quad , \text{ falls } \phi_k < \text{MIN}(\phi_{k+1/2}, \phi_{k-1/2}) \\ \phi_{k-1/2} = 3\phi_k - 2\phi_{k+1/2} & \quad , \text{ falls } \phi_k > \text{MIN}(\phi_{k+1/2}, \phi_{k-1/2}) \text{ und } \phi_{k+1/2} > \phi_{k-1/2} \\ \phi_{k+1/2} = 3\phi_k - 2\phi_{k-1/2} & \quad , \text{ falls } \phi_k > \text{MIN}(\phi_{k+1/2}, \phi_{k-1/2}) \text{ und } \phi_{k+1/2} < \phi_{k-1/2} \end{aligned} \quad (3.43)$$

An dieser Stelle muß erwähnt werden, daß nach Anwendung von (3.42) und (3.43) die Funktion am Rand nicht mehr stetig ist.

### 3.5 Ergebnisse der Experimente in einer Dimension

Die Eigenschaften der Zellintegrationsmethode werden nun anhand eindimensionaler Testfälle etwas näher untersucht.

Das Modellgebiet für diese Tests umfaßt  $K=50$  Gitterpunkte und hat einen zyklischen Rand. Der Transport eines analytisch vorgegebenen Signals soll mit konstanter Geschwindigkeit erfolgen und zwar derart, daß pro Zeitschritt eine halbe Gitterweite zurückgelegt wird. Nach 100 Zeitschritten hat das Signal dann wieder seine Ausgangsposition erreicht. In den durchgeführten Experimenten wird jeweils das Ergebnis nach drei vollen Umrundungen betrachtet. Das zu transportierende Feld ist einmal ein Rechtecksignal,

$$\phi(k\Delta\xi, t=0) = \begin{cases} 1, & 22 \leq k \leq 27 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.44)$$

für  $k=1, \dots, K$  und zum zweiten ein Dreiecksignal

$$\phi(k\Delta\xi, t=0) = \begin{cases} (1/3)(k-22), & k=23, 24, 25 \\ 1 - (1/3)(k-25), & k=26, 27 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.45)$$

Die Breite des Signals beträgt in beiden Fällen sechs Gitterboxen. Folgende Experimente wurden mit beiden Profilen durchgeführt:

Im ersten Experiment wird das Signal durch konstante Funktionen approximiert. Anschließend wurde eine lineare Funktion verwendet und zwar mit drei verschiedenen Möglichkeiten die Steigung zu berechnen, zentrierte Differenzen ohne Einschränkung, eine monotone und eine positiv definite Variante. Schließlich wurden Parabeln benutzt und zwar wieder ohne jegliche Einschränkung, sowie jeweils eine monotone und positiv definite Lösung. Als Vergleich wurde ein traditionelles semi-Lagrange-Verfahren herangezogen, einmal mit linearer Interpolation (aus (3.20) ergibt sich mit  $p = 0$  und  $\hat{\alpha} = 0,5$ ),

$$\phi_k^{n+1} = \frac{1}{2}(\phi_k^n + \phi_{k-1}^n) \quad (3.46)$$

und dann mittels kubischer Interpolation

$$\phi_k^{n+1} = - (1/16)\phi_{k-1}^n + (9/16)\phi_k^n + (9/16)\phi_{k+1}^n - (1/16)\phi_{k+2}^n \quad (3.47)$$

und abschließend noch eine quasi-monotone kubische Interpolation. Dabei wird der interpolierte Wert auf den Bereich der von  $\phi_k^n$  und  $\phi_{k+1}^n$  aufgespannt wird, begrenzt.

| Experiment  | Beschreibung   | Gleichungen            |
|-------------|--|------------------------|
| ZIKON       | Zellintegration mit konstanten Funktionen                    | (3.17)                 |
| ZILIN       | Zellintegration mit linearen Funktionen                      | (3.25), (3.30)         |
| ZILIN MON   | Zellintegration mit linearen Funktionen und Monotonie        | (3.25), (3.30), (3.32) |
| ZILIN POS   | Zellintegration mit linearen Funktionen und Positivität      | (3.25), (3.30), (3.33) |
| ZIPAR       | Zellintegration mit quadratischen Funktionen                 | (3.38), (3.40)         |
| ZIPAR MON   | Zellintegration mit quadratischen Funktionen und Monotonie   | (3.38), (3.40), (3.42) |
| ZIPAR POS   | Zellintegration mit quadratischen Funktionen und Positivität | (3.38), (3.40), (3.43) |
| LIN INT     | lineare Interpolation  | (3.46)                 |
| KUB INT     | kubische Interpolation                                       | (3.47)                 |
| KUB-MON INT | quasi-monotone kubische Interpolation                        | (3.47), (3.48), (3.49) |

**Tab. 3.1** Übersicht der 1D-Experimente: In der linken Spalte steht der Name des Experiments, in der Mitte die genauere Beschreibung und rechts die wichtigsten Gleichungen die jeweils verwendet werden.

Dazu wird zunächst eine kubische Interpolation (3.47) durchgeführt, dessen Ergebnis  $(\phi')_k^{n+1}$  sei, dann ist die quasi-monotone Lösung durch folgenden Ablauf sichergestellt:

Es ist

$$\phi_{\min} = \text{MIN}(\phi_k^n, \phi_{k+1}^n) \quad (3.48a)$$

$$\phi_{\max} = \text{MAX}(\phi_k^n, \phi_{k+1}^n) \quad (3.48b)$$

und schließlich

$$\phi_k^{n+1} = \text{MIN}(\phi_{\max}, \text{MAX}(\phi_{\min}, (\phi')_k^{n+1})). \quad (3.49)$$

In Tabelle 3.1 sind die verschiedenen Experimente und die entsprechenden Gleichungen noch einmal zusammengefaßt. Bevor die Ergebnisse nun diskutiert werden, möchte ich noch kurz einige Bemerkungen zu den Fehlermaßen anschließen. Da bei den beschriebenen Experimenten die analytische Lösung bekannt ist, liegt es nahe den mittleren quadratischen Fehler zu untersuchen, der hier mit  $E_{\text{GES}}$  bezeichnet wird. Dieser lautet

$$E_{\text{GES}} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K (\phi_k^A - \phi_k^N)^2, \quad (3.50)$$

$K$  ist die Anzahl der Gitterpunkte,  $\phi_k^A$  ist die analytische Lösung am Gitterpunkt  $k$  und  $\phi_k^N$  die entsprechende numerische Lösung. Wie bei *Takacs (1985)* nachzulesen ist, läßt sich der Gesamtfehler in zwei Anteile aufspalten: Einen Anteil aufgrund von Dissipation und einen Anteil der durch Dispersion hervorgerufen wird. Es ist

$$E_{\text{DISS}} = [\sigma(\phi^A) - \sigma(\phi^N)]^2 + (\bar{\phi}^A - \bar{\phi}^N)^2 \quad (3.51)$$

und

$$E_{\text{DISP}} = 2(1 - \rho)\sigma(\phi^A)\sigma(\phi^N) \quad (3.52)$$

$\rho$  ist der Korrelationskoeffizient zwischen der analytischen und numerischen Lösung,  $\bar{\phi}^A$  bzw.  $\bar{\phi}^N$  sind die jeweiligen Mittelwerte und  $\sigma$  ist die entsprechende Standardabweichung. Anschaulich hat der dissipative Fehleranteil zur Folge, daß die numerische Lösung meist einer gewissen Dämpfung unterliegt und die Amplitude des Signals kleiner wird. Wenn man das transportierte Signal einer Frequenzanalyse unterzieht stellt man fest, daß bei den kurzen Wellenlängen eine Diskrepanz in der Phasengeschwindigkeit zwischen numerischer

und analytischer Lösung besteht. Diesen Effekt nennt man Dispersion. Je größer der dadurch verursachte Fehler ist, desto mehr sind numerische und analytische Lösung außer Phase. Falls  $\phi_k^A$  und  $\phi_k^N$  exakt korreliert sind der gesamte Fehler rein dissipativ. In der Praxis kommt aber immer ein dispersiver Anteil hinzu. In Tabelle 3.2 sind diese Fehler für das Experiment mit dem Dreiecksignal aufgeführt und in Tabelle 3.3 diejenigen für das Rechtecksignal.

|             | $E_{DISS}$           | $E_{DISP}$           | $E_{TOT}$            |
|-------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| ZIKON       | $2.23 \cdot 10^{-2}$ | $9.41 \cdot 10^{-3}$ | $3.18 \cdot 10^{-2}$ |
| ZILIN       | $2.87 \cdot 10^{-3}$ | $8.59 \cdot 10^{-3}$ | $1.13 \cdot 10^{-2}$ |
| ZILIN MON   | $5.82 \cdot 10^{-3}$ | $1.01 \cdot 10^{-2}$ | $1.59 \cdot 10^{-2}$ |
| ZILIN POS   | $4.47 \cdot 10^{-3}$ | $7.23 \cdot 10^{-3}$ | $1.17 \cdot 10^{-2}$ |
| ZIPAR       | $8.03 \cdot 10^{-4}$ | $4.29 \cdot 10^{-3}$ | $5.09 \cdot 10^{-3}$ |
| ZIPAR MON   | $3.09 \cdot 10^{-3}$ | $7.36 \cdot 10^{-3}$ | $1.04 \cdot 10^{-2}$ |
| ZIPAR POS   | $1.43 \cdot 10^{-3}$ | $2.89 \cdot 10^{-3}$ | $4.33 \cdot 10^{-3}$ |
| LIN INT     | $2.23 \cdot 10^{-3}$ | $9.41 \cdot 10^{-3}$ | $3.18 \cdot 10^{-2}$ |
| KUB INT     | $2.87 \cdot 10^{-3}$ | $8.61 \cdot 10^{-3}$ | $1.15 \cdot 10^{-3}$ |
| KUB-MON INT | $1.06 \cdot 10^{-3}$ | $8.49 \cdot 10^{-3}$ | $1.91 \cdot 10^{-3}$ |

**Tab. 3.2** Fehlertabelle der Experimente mit einem Dreiecksignal

Die Abbildungen zu den Experimenten sind am Ende dieses Kapitels zu finden. In allen Bildern sind die Ergebnisse nach drei Umrundungen zu sehen. Das Anfangssignal ist jeweils durch eine dünne, durchgezogene Linie dargestellt. Zunächst werden die Experimente, bei denen die Zellintegration mit konstanten, linearen und quadratischen Funktionen im Mittelpunkt steht und die keinen weiteren Einschränkungen, wie Monotonie oder Positivität, unterliegen betrachtet. Es sind die Experimente ZIKON, ZILIN und ZIPAR. Es stellt sich heraus, daß mit wachsendem Grad der Polynome der totale Fehler kleiner wird. Dies gilt sogar für den dissipativen und dispersiven Fehler separat. Das ist leicht zu verstehen, wenn man bedenkt, daß mit steigendem Grad der Funktion immer mehr Boxmittelwerte hinzugenommen werden, um den Verlauf des Signals innerhalb einer Box zu ermitteln. Je genauer diese Darstellung aber ist, um so besser repräsentieren die berechneten Funktionen den tatsächlichen funktionalen Verlauf. Insbesondere stellt die numerische Behandlung von Variablen mit großem räumlichen Gradienten jedes Verfahren vor eine Herausforderung. Je glatter ein Signal ist, desto kleiner ist in der Regel der Fehler des Verfahrens. Dies erklärt

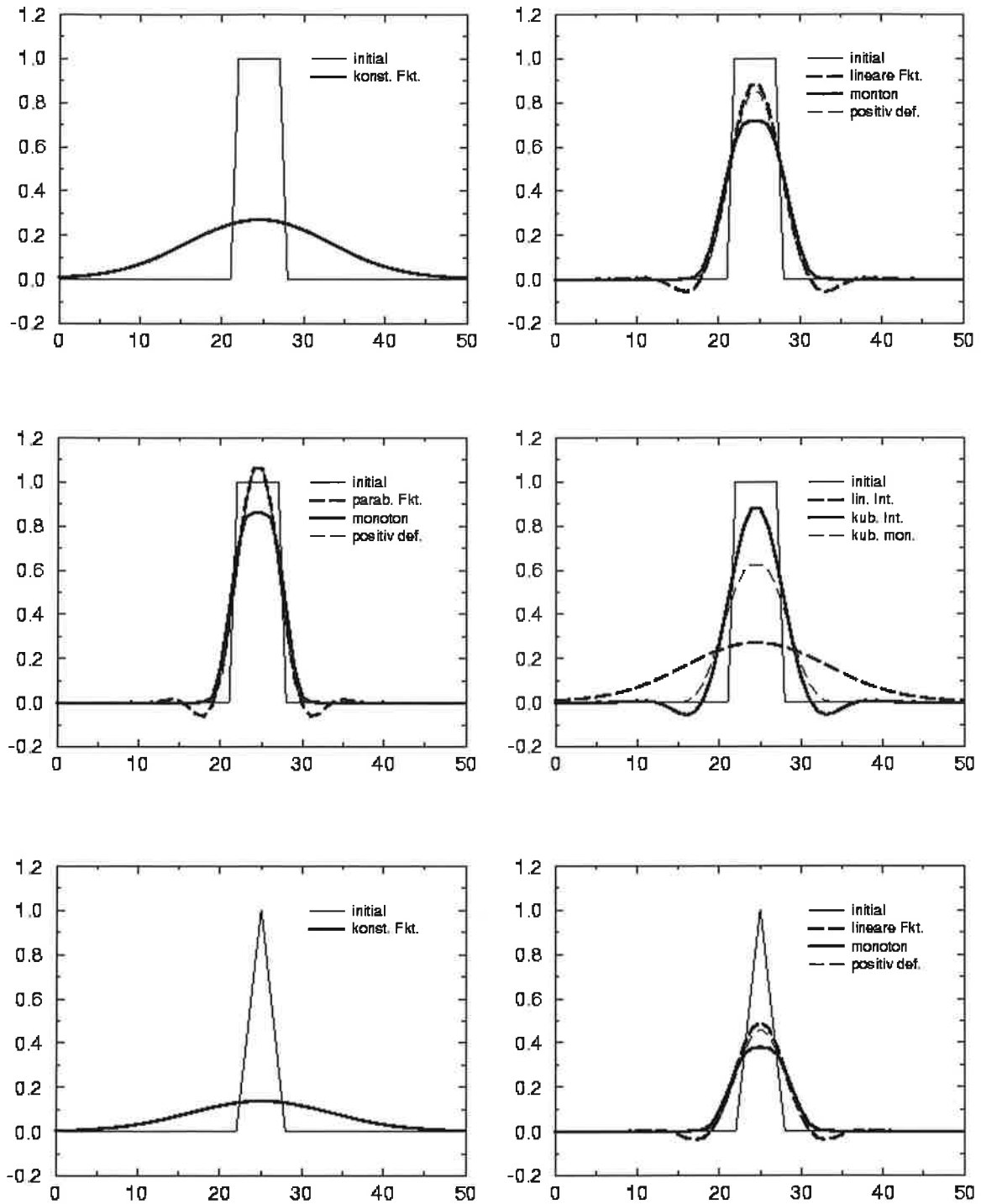


auch hier, warum die Fehler der Experimente mit dem Rechtecksignal ausnahmslos größer sind als die mit dem Dreiecksignal.

|             | $E_{DISS}$           | $E_{DISP}$           | $E_{TOT}$            |
|-------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| ZIKON       | $5.39 \cdot 10^{-2}$ | $2.53 \cdot 10^{-2}$ | $7.92 \cdot 10^{-2}$ |
| ZILIN       | $3.57 \cdot 10^{-3}$ | $1.59 \cdot 10^{-2}$ | $1.95 \cdot 10^{-2}$ |
| ZILIN MON   | $8.46 \cdot 10^{-3}$ | $1.73 \cdot 10^{-2}$ | $2.57 \cdot 10^{-2}$ |
| ZILIN POS   | $5.72 \cdot 10^{-3}$ | $1.34 \cdot 10^{-2}$ | $1.91 \cdot 10^{-2}$ |
| ZIPAR       | $8.94 \cdot 10^{-4}$ | $1.08 \cdot 10^{-2}$ | $1.17 \cdot 10^{-2}$ |
| ZIPAR MON   | $3.46 \cdot 10^{-3}$ | $1.02 \cdot 10^{-2}$ | $1.37 \cdot 10^{-2}$ |
| ZIPAR POS   | $1.41 \cdot 10^{-3}$ | $9.48 \cdot 10^{-3}$ | $1.09 \cdot 10^{-2}$ |
| LIN INT     | $5.39 \cdot 10^{-2}$ | $2.53 \cdot 10^{-2}$ | $7.92 \cdot 10^{-2}$ |
| KUB INT     | $3.57 \cdot 10^{-3}$ | $1.60 \cdot 10^{-2}$ | $1.96 \cdot 10^{-2}$ |
| KUB-MON INT | $1.55 \cdot 10^{-2}$ | $1.77 \cdot 10^{-2}$ | $3.31 \cdot 10^{-2}$ |

**Tab. 3.3** Fehlertabelle der Experimente mit einem Rechtecksignal

Bei den Experimenten mit konstanter Funktion ist der Anteil von  $E_{DISS}$  mit mehr als zwei Drittel am Gesamtfehler sehr groß, d.h. dieses Verfahren wirkt vor allem stark dämpfend auf ein vorgegebenes Signal und die Verteilung wird im Laufe der Zeit über das gesamte Gebiet "verschmiert". Dieses Verhalten ist von der Upstream-Methode her bekannt, dessen Äquivalenz zu SLZI mit konstanten Funktionen und zur linearen Interpolation in Kap. 3.2 formal bewiesen wurde. Ein Blick auf die Ergebnisse von ZIKON und LIN INT bestätigt diese Übereinstimmung auch im Experiment. Vergleicht man zudem die Ergebnisse der Integration mit linearen Funktionen (ZILIN) und klassischer kubischer Interpolation (KUB INT), erkennt man dass diese beiden Verfahren Fehler in fast der gleichen Größe aufweisen. In den Experimenten mit linearen bzw. quadratischen Funktionen wird der totale Fehler deutlich kleiner und der dispersive Fehler wird mit einem Anteil von 10-20% dominierend. Der höhere Grad der Polynome bewirkt eine deutliche Reduktion der Dämpfung und dispersive Effekte überwiegen. Das gleiche kann man natürlich auch bei der klassischen Interpolation beobachten. Die Fehler bei kubischer Interpolation sind entsprechend deutlich geringer als bei linearer Interpolation.



**Abb. 3.6** Ergebnisse der eindimensionalen Experimente: Oben und in der Mitte sind Resultate des Rechteckexperimentes zu sehen, in der unteren Reihe die Kurven des Dreieckexperimentes, Einzelheiten sind jeweils der Legende zu entnehmen.

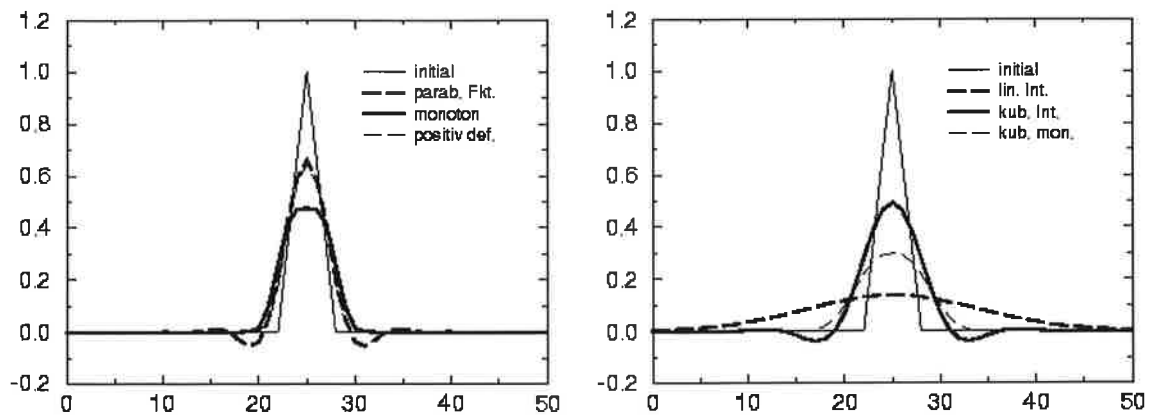


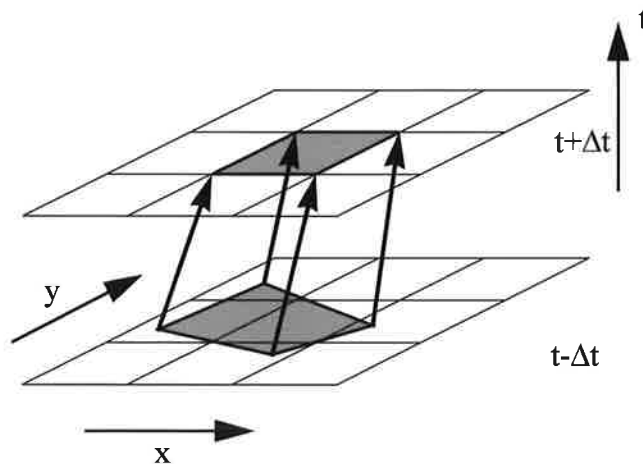
Abb. 3.7 Ergebnisse der eindimensionalen Dreieckexperimente. Einzelheiten sind wiederum jeweils der Legende zu entnehmen.

Betrachtet man nun die Experimente mit monotoner bzw. positiv definiten Lösung erkennt man, daß beide Beschränkungen einen dämpfenden Einfluß auf die Ergebnisse haben. Die monotone Lösung schneidet dabei natürlich schlechter ab als die positiv definite Variante, da letztere nur negative Werte unterdrückt. Der dispersive Fehler wird bei beiden etwas geringer, d.h. das Signal ist durch die Beseitigung von "Unter- und Überschwängern" etwas besser mit der analytischen Lösung korreliert. Schaut man auf den Gesamtfehler so ist nur im Experiment mit dem Dreiecksignal und linearer Integration der Fehler bei der positiv definiten Lösung geringfügig größer geworden, bei allen anderen Experimenten mit dieser Beschränkung ist der totale Fehler etwas reduziert worden. In den Experimenten mit einem Rechtecksignal liefert die positiv definite Lösung einen durchweg kleineren totalen Fehler. Dies ist vor allem auf die Reduzierung des dispersiven Anteils zurückzuführen. Bei der streng monotonen Lösung ist der gesamte Fehler bei allen Experimenten schlechter als die Lösung ohne jede Einschränkung. Dieses Verhalten kann man allerdings auch bei klassischer kubischer Interpolation beobachten, der Vorteil einer quasi-monotonen Lösung geht zu Lasten einer stärkeren Dämpfung was sich schließlich auch in einem größeren Gesamtfehler niederschlägt.



## 4. Das Zellintegrationsverfahren in der Ebene

Das in Kapitel 3 vorgestellte Verfahren soll nun für ebene kartesische Koordinaten verallgemeinert werden. Insbesondere steht in diesem Abschnitt die Betrachtung der zweidimensionalen konservativen Abbildung einer skalaren Größe zwischen einem unregelmäßigen und einem regelmäßigen Gitternetz im Mittelpunkt. In Abb. 4.1 ist die Beziehung zwischen beiden Gittern illustriert: Trajektorien, die zum Zeitpunkt  $t+\Delta t$  an den Ecken von Zellen des regelmäßigen Gitters enden, bilden mit ihren Anfangspunkten die Ecken von Zellen des unregelmäßigen Gitters zur Zeit  $t-\Delta t$ , die sogenannten Startzellen. Die Seiten der Startzellen werden als gerade Linien angenommen.



**Abb. 4.1** Illustration des unregelmäßigen Gitters, das durch die Startpunkte der Trajektorien, die an den Eckpunkten des regelmäßigen Gitters enden, definiert wird.

Das sind die geometrischen Bedingungen die im nun folgenden Abschnitt eine wichtige Rolle spielen. Ziel ist es einen vernünftigen Algorithmus zu finden, der die konservative Abbildung zwischen zwei verschiedenen Gittern realisiert.

### 4.1 Transportgleichung in zwei Dimensionen

Die zu (3.4) entsprechende Gleichung, die das 2D-Problem behandelt, lautet:

$$\frac{d}{dt}(\phi \delta A) = 0 \quad (4.1)$$

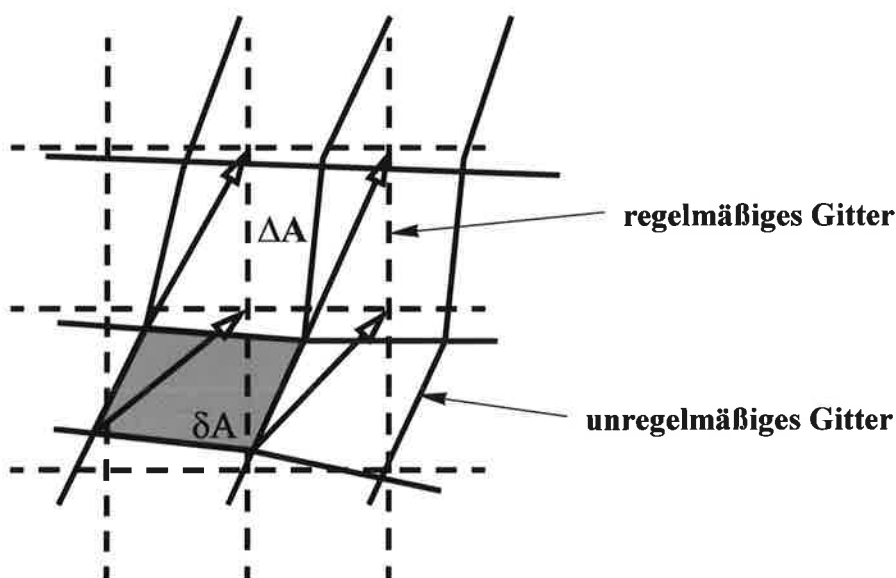
$\phi$  ist hier wiederum eine skalare Variable, die vom Ort und von der Zeit abhängt, es ist

$$\phi_{ij}^n = \phi(i\Delta\xi, j\Delta\eta, n\Delta t) \quad (4.2)$$

wobei  $\Delta\xi=\Delta\eta$ , die Maschenweite des Gitters ist.  $\delta A$  ist ein infinitesimal kleines Flächenelement. Integriert man (4.1) über eine Gitterzelle, so ergibt sich analog zu (3.4) bis (3.8),

$$\int_{\Delta A} \int \phi(\xi_i, \eta_j, t + \Delta t) d\xi d\eta = \int_{\delta A_{ij}^-} \int \phi(\xi_i, \eta_j, t - \Delta t) d\xi d\eta. \quad (4.3)$$

Die Integration zur Zeit  $t+\Delta t$  erfolgt über die Fläche  $\Delta A=\Delta\xi\Delta\eta$ , während zur Zeit  $t-\Delta t$  die entsprechende Fläche  $\delta A_{ij}^-$  ist. Diese ist in Abb. 4.2 schraffiert dargestellt und im allgemeinen für jede Gitterzelle verschieden.



**Abb. 4.2** Das Flächenstück  $\delta A$  ist ein allgemeines Viereck, in der Abbildung schraffiert dargestellt, während  $\Delta A$  ein Quadrat oder Rechteck ist.

Benutzt man die Tatsache, daß im Rahmen der volumenorientierten Methoden Gitterpunktwerte  $\phi_{ij}^n$  den Mittelwert der Konzentration  $\phi(\xi, \eta, t)$  in der Zelle  $(i, j)$  bilden, d.h.

$$\phi_{ij}^n = \frac{1}{\Delta A} \int_{\Delta A} \int \phi(\xi_i, \eta_j, t) d\xi d\eta \quad (4.4)$$

vereinfacht sich (4.3) zu

$$\phi_{ij}^{n+1} = \frac{1}{\Delta A} \int_{\delta A_{ij}^-} \int \phi(\xi_i, \eta_j, t - \Delta t) d\xi d\eta. \quad (4.5)$$

Die Berechnung von  $\phi^{n+1}$  reduziert sich damit auf die Integration einer im allgemeinen unbekanntes Funktion über ein unregelmäßiges Gebiet  $\delta A_{ij}^-$ . Das Gebiet ist ein Viereck, dessen Ecken, wie oben beschrieben, von den Startpunkten der Trajektorien und damit von der Strömung abhängen.

## 4.2 Trajektorienberechnung

Die Berechnung der Trajektorien in ebenen kartesischen Koordinaten verläuft analog zum eindimensionalen Fall, wie er in Kapitel 2 beschrieben ist. Für einen Gitterpunkt  $(\xi_i, \eta_j)$  ist  $\alpha_i$  bzw.  $\beta_j$  ist die Distanz, die das Luftpaket in der Zeit  $\Delta t$  in  $\xi$ - bzw.  $\eta$ -Richtung zurücklegt. Analog zu (2.4) ergeben sich die Distanzen aus einem iterativen Prozeß,

$$\alpha_i^{(k+1)} = \Delta t u(\xi_i - \alpha_i^{(k)}, \eta_j - \beta_j^{(k)}, t_n) \quad (4.6a)$$

$$\beta_j^{(k+1)} = \Delta t v(\xi_i - \alpha_i^{(k)}, \eta_j - \beta_j^{(k)}, t_n) \quad (4.6b)$$

mit entsprechenden Anfangswerten  $\alpha_i^{(0)}$  und  $\beta_j^{(0)}$ .  $k$  in (4.6) ist der Iterationsindex und  $t_n$  bezeichnet den aktuellen Zeitpunkt. Die Geschwindigkeitskomponenten  $u$  bzw.  $v$  werden zwischen den Gitterpunkten mit Hilfe bilinearer oder bikubischer Interpolation bestimmt. Es hat sich gezeigt das zwei Iterationen ausreichend sind, denn jede weitere Iteration bringt keinen großen Zuwachs in der Genauigkeit.

## 4.3 Konservative Abbildung

Die Art und Weise wie das Integral in (4.5) gelöst werden kann wird im nächsten Schritt untersucht. Dabei werden unterschiedliche Varianten diskutiert, die sich hauptsächlich in der Art des verwendeten Abbildungsverfahrens unterscheiden.

### 4.3.1 Integration biquadratischer Funktionen

Führt man die Argumentation aus Kapitel 3 fort, muß man zur Lösung von (4.5) in jeder Gitterzelle des regelmäßigen Gitters zweidimensionale, analytische Funktionen  $\phi(\xi_i, \eta_j)$  definieren. Jede Funktion muß dabei dem korrektem Mittelwert entsprechen, d.h. Gleichung (4.4) erfüllen. Die einfachste Annahme wäre auch hier wieder, wie im eindimensionalen Fall, eine konstante Funktion. Diese wird aber, aus den im vorhergehenden Kapitel erläuterten Gründen nicht weiter betrachtet.

*Rancic (1992)* hat als Kompromiß zwischen den gewünschten Eigenschaften auf der einen Seite und dem rechnerischen Aufwand andererseits, stückweise biquadratische Funktionen angenommen, d.h.

$$\phi_{ij}(x, y) = a_2(y)x^2 + a_1(y)x + a_0(y). \quad (4.7)$$

Dabei ist

$$a_2(y) = a_{22}y^2 + a_{21}y + a_{20} \quad (4.8)$$

$$a_1(y) = a_{12}y^2 + a_{11}y + a_{10} \quad (4.9)$$

$$a_0(y) = a_{02}y^2 + a_{01}y + a_{00} \quad (4.10)$$

und  $x$  bzw.  $y$  sind Hilfskoordinaten

$$x = \frac{\xi - \xi_{i-1/2}}{\Delta\xi} \quad (4.11)$$

$$y = \frac{\eta - \eta_{j-1/2}}{\Delta\eta} \quad (4.12)$$

die innerhalb einer Gitterzelle zwischen 0 und 1 variieren, wobei (0,0) in der südwestlichen Ecke der Zelle liegt. Die Bestimmung der neun Koeffizienten erfolgt in einer Weise, so daß (4.4) erfüllt ist. Verlangt man außerdem, daß die Funktionen an interpolierte Werte in den Ecken und Seitenmittelpunkten einer Zelle exakt angepaßt werden, erhält man insgesamt neun Bedingungen zur eindeutigen Bestimmung der neun Koeffizienten. Im Anschluß an deren Berechnung kann die nun bekannte Funktion in jeder Zelle über das entsprechende Gebiet  $\delta A^-$  integriert werden. Bei *Rancic (1992)* wird das so gelöst, daß die Integration über das unregelmäßige Gebiet in Elementarintegrale zerlegt wird. Diese Elementarintegrale erlauben dann eine Integration parallel zu den Koordinatenachsen und sind somit leicht analytisch auszuführen.

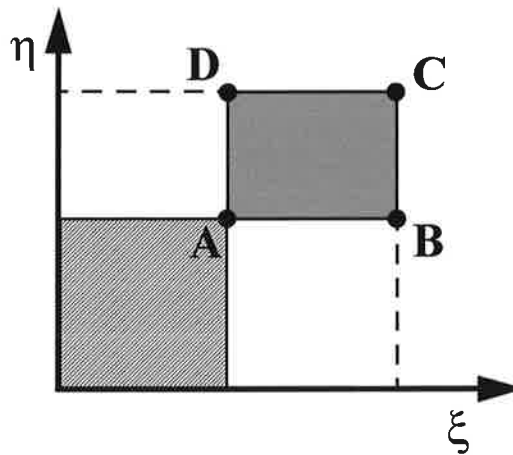
*Rancic* konnte zeigen, daß diese Methode zusätzlich zur Massenerhaltung auch in anderen Eigenschaften etwas bessere Ergebnisse brachte als ein traditionelles semi-Lagrangisches Schema mit bikubischer Interpolation. Allerdings brauchte das Verfahren in seiner Testumgebung auch etwa 2,5-mal mehr CPU-Zeit. Bedenkt man eine Erweiterung des Verfahrens auf drei Dimensionen wird diese Rechnung sicher noch ungünstiger. Neben der Integration müssen dann pro Gitterzelle und Zeitschritt 27 Koeffizienten berechnet werden. Deshalb wird in den nächsten Unterabschnitten 4.3.2 bzw. 4.3.3 eine Alternative für zwei Dimensio-



nen und in Kapitel 7.1 für drei Dimensionen vorgestellt, die hinsichtlich des Aufwandes günstiger ist ohne von den positiven Eigenschaften einzubüßen.

### 4.3.2 Das Prinzip der akkumulierten Masse in einem Punkt

Ausgangspunkt des neuen Verfahrens ist der Begriff der akkumulierten Masse in einem Punkt, wie er in *Machenhauer und Olk (1996)* eingeführt wurde. Betrachtet man Abb. 4.3, dann ist die akkumulierte Masse im Punkt A mit den Koordinaten  $(\xi_A, \eta_A)$  die gesamte Masse südlich und westlich von A. In der Grafik ist dies als hell schraffierte Fläche dargestellt. Die Wahl des Koordinatenursprungs als Bezugspunkt ist in dieser Definition beliebig. Eine entsprechende Definition wäre bezüglich jedes anderen Punktes ebenso möglich.



**Abb. 4.3** Die akkumulierte Masse in Punkt A,  $M_A$ , ist die hell schraffierte Fläche. Aus der akkumulierten Masse in den vier Eckpunkten läßt sich die Masse  $m_{ABCD}$  im Rechteck ABCD bestimmen.

Mit Hilfe dieser Definition läßt sich die Masse innerhalb des Rechtecks ABCD bestimmen. Bezeichnet man mit  $M_X$  die akkumulierte Masse im Punkt X, dann gilt

$$m_{ABCD} = M_C - M_D - M_B + M_A. \quad (4.13)$$

Das Integrationsgebiet  $\delta A_{ij}$  in (4.5) ist aber im allgemeinen kein Rechteck sondern ein beliebiges Viereck. Anhand des Beispiels in Abb. 4.4 wird gezeigt, daß die eben beschriebene Vorgehensweise dennoch sinnvoll eingesetzt werden kann, um die Masse  $m_{ABCD}$  im beliebigen Viereck ABCD zu bestimmen, d.h. die rechte Seite von Gleichung (4.4) zu ermitteln. Die Koordinaten der Punkte A, B, C und D sind dann die Startpunkte der Trajektorien die im nächsten Zeitschritt an den Eckpunkten einer Gitterzelle enden. Die Notation

sei derart gewählt, daß für eine Gitterzelle mit dem Mittelpunkt  $(\xi_{i,j}, \eta_{i,j})$ , die Koordinaten des Startpunktes der Trajektorie, die an der südwestlichen Ecke der Zelle endet,  $(\xi_{i,j}^*, \eta_{i,j}^*)$  sind. Der Stern deutet an, daß es sich bei den Koordinaten um Werte handelt, die im allgemeinen zwischen Gitterpunkten liegen.

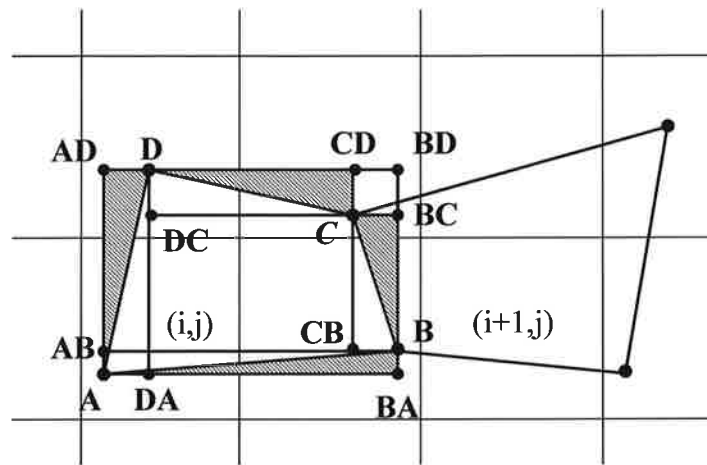


Abb. 4.4 Skizze zur Verdeutlichung der Notation in einem allgemeinen Viereck ABCD.

Für das Beispiel in Abbildung 4.4 gilt:

$$A = (\xi_{i,j}^*, \eta_{i,j}^*), B = (\xi_{i+1,j}^*, \eta_{i+1,j}^*), C = (\xi_{i+1,j+1}^*, \eta_{i+1,j+1}^*) \text{ und} \\ D = (\xi_{i,j+1}^*, \eta_{i,j+1}^*).$$

Durch diese vier Punkte sind aber auch die Koordinaten der anderen Punkte eindeutig festgelegt. Es ist  $AD = (\xi_{i,j}^*, \eta_{i,j+1}^*)$ , um nur ein Beispiel zu nennen. Eine einfache Betrachtung ergibt nun, daß die Masse im Viereck ABCD gleich der Masse im äußeren Rechteck abzüglich der Masse des kleinen Rechtecks und der vier schraffierten Dreiecke ist, d.h.:

$$m_{ABCD} = (M_{BD} - M_{AD} - M_{BA} + M_A) \tag{4.14} \\ - (M_{BD} - M_{CD} - M_{BC} + M_C) \\ - \frac{1}{2} [(M_{CD} - M_D - M_C + M_{DC}) + (M_D - M_{AD} - M_{DA} + M_A)] \\ + (M_B - M_{AB} - M_{BA} + M_A) + (M_{BC} - M_C - M_B + M_{CB})]$$

Eine Zusammenfassung der Terme ergibt schließlich,



$$M_C = M_A + m(\Omega_1) + m(\Omega_2) + m(\Omega_3), \quad (4.17)$$

$m(\Omega_i)$ , ( $i=1,2,3$ ) ist die Masse im jeweils schraffierten Gebiet  $\Omega_i$ .  $M_A$  ist nach Definition aber einfach

$$M_A = \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{j=1}^{J-1} \phi_{ij} \Delta A \quad (4.18)$$

die akkumulierte Masse in A.

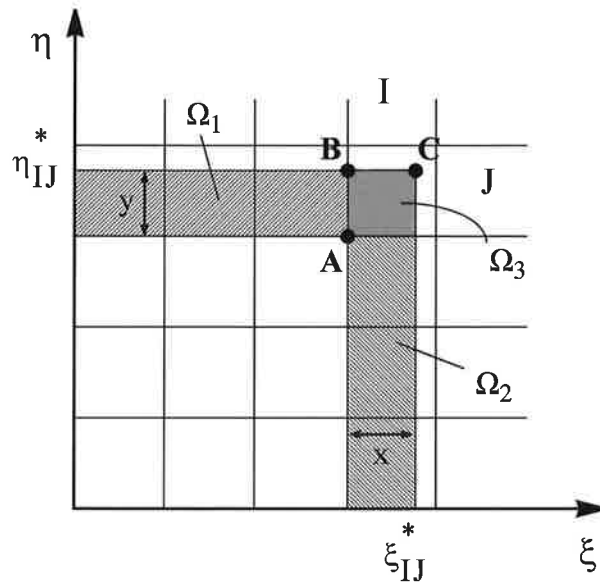


Abb. 4.6 Berechnung der akkumulierten Masse im Punkt C

Die Masse im Gebiet  $\Omega_1$  kann man durch Integration der entsprechenden Funktion gewinnen,

$$m(\Omega_1) = \int_0^y (c_j y^2 + b_j y + a_j) dy = \frac{1}{3} c_j y^3 + \frac{1}{2} b_j y^2 + a_j y. \quad (4.19)$$

Die Koeffizienten  $a_j$ ,  $b_j$  und  $c_j$  errechnen sich gemäß (3.38) und sie sind die Koeffizienten der Parabel für die Verteilung der Masse in  $\eta$ -Richtung innerhalb von  $\Omega_1$ . Die fünf in  $\xi$ -Richtung akkumulierten Massen die dafür gebraucht werden sind,

$$\sum_{i=1}^{I-1} \phi_{ij}, \quad j = J-2, \dots, J+2. \quad (4.20)$$

In (4.20), wie auch in allen folgenden Gleichungen, die eine akkumulierte Masse beschreiben, muß die Summe genau genommen noch mit der Fläche  $\Delta A$  multipliziert werden. Gebiet  $\Omega_2$  ist nun analog zu betrachten,

$$m(\Omega_2) = \int_0^x (c_I x^2 + b_I x + a_I) dx = \frac{1}{3} c_I x^3 + \frac{1}{2} b_I x^2 + a_I x, \quad (4.21)$$

$a_I$ ,  $b_I$  und  $c_I$  bestimmt man aus fünf in  $\eta$ -Richtung akkumulierten Massen und sie bilden die Koeffizienten der Parabel für die Verteilung der Masse in  $\xi$ -Richtung innerhalb von  $\Omega_2$ . Die fünf akkumulierten Massen sind nun,

$$\sum_{j=1}^{J-1} \phi_{ij}, \quad i = I-2, \dots, I+2. \quad (4.22)$$

Und schließlich erhält man  $m(\Omega_3)$ ,

$$m(\Omega_3) = \int_0^x (c_{IJ} x^2 + b_{IJ} x + a_{IJ}) dx = \frac{1}{3} c_{IJ} x^3 + \frac{1}{2} b_{IJ} x^2 + a_{IJ} x, \quad (4.23)$$

die akkumulierten Massen zur Berechnung der Koeffizienten sind diesmal,

$$\frac{1}{3} c_{iJ} y^3 + \frac{1}{2} b_{iJ} y^2 + a_{iJ} y, \quad i = I-2, \dots, I+2 \quad (4.24)$$

wobei  $a_{iJ}$ ,  $b_{iJ}$  und  $c_{iJ}$  jeweils die Parabel für die Verteilung der Masse in  $\xi$ -Richtung innerhalb der Zellen  $(I-2, J), \dots, (I+2, J)$  festlegen.

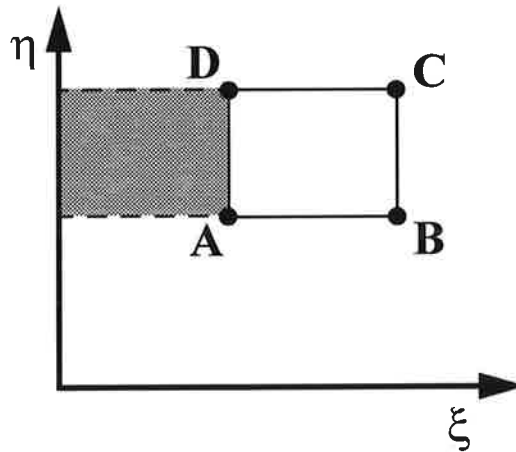
Da pro Gitterzelle die akkumulierte Masse an vier Punkten zu berechnen ist, stellt sich die Frage, ob in dem beschriebenen Verfahren noch redundante Berechnungen enthalten sind. Weiterhin liefert das Verfahren eine Quelle die eine Ungenauigkeit, welche nicht auf den ersten Blick zu erkennen ist, zur Folge haben kann. Diese liegt in der Berechnung von Differenzen akkumulierter Massen. Die akkumulierten Massen sind Werte, die im gewählten Koordinatensystem von links unten nach rechts oben zunehmen. Die Differenz zwischen sehr großen Werten kann aber nur bis zu einer vom Rechner abhängigen Grenze genau bestimmt werden. Im ungünstigsten Fall bekommt man so eine über das ganze Gebiet unterschiedliche genaue Verteilung. Im folgenden Abschnitt wird eine Alternative diskutiert, die bzgl. der Redundanzen und der Genauigkeit günstiger abschneidet.

### 4.3.3 Eine Alternative: Die akkumulierte Masse einer Linie

Analog zur Definition der akkumulierten Masse in einem Punkt, kann man die akkumulierte Masse einer Linie parallel zur  $\xi$ - bzw.  $\eta$ -Achse definieren. Dies ist dann die gesamte Masse südlich bzw. westlich dieser Linie bis zur entsprechenden Koordinatenachse. In Abb. 4.7 ist diese Definition wiederum für die Masse in einem Rechteck ABCD veranschaulicht. Ist  $M_{X,Y}$  die akkumulierte Masse einer Linie mit den Endpunkten X und Y, dann gilt für das Rechteck in Abb. 4.7:

$$m_{ABCD} = M_{C,B} - M_{A,D}. \quad (4.25)$$

In diesem Beispiel wurde die Definition einer Linie parallel zur  $\eta$ -Achse zugrunde gelegt. Diese Wahl wird bei den folgenden Ausführungen beibehalten ist aber prinzipiell beliebig.



**Abb. 4.7** Die akkumulierte Masse der Linie AD,  $M_{A,D}$  ist die schraffierte Fläche. Aus der akkumulierten Masse der Linien AD und BC lässt sich die Masse  $m_{ABCD}$  im Rechteck ABCD bestimmen.

Auf ähnliche Weise wie zuvor kann man auch diesmal die Masse in einem beliebigen Viereck bestimmen. Für das Beispiel in Abb. 4.4 erhält man dann:

$$m_{ABCD} = \frac{1}{2} [(M_{BC,B} + M_{C,CB}) - (M_{D,DA} + M_{A,AD}) + VZ_1 \cdot (M_{CD,C} + M_{D,DC}) + VZ_2 \cdot (M_{B,BA} + M_{AB,A})] \quad (4.26)$$

$VZ_1$  und  $VZ_2$  sind Vorzeichen mit dem der Beitrag der “nördlichen” bzw. “südlichen” Seite des Vierecks in die Gesamtmasse eingeht. Es ist

$$VZ_1 = \text{sign}(\eta_D^* - \eta_C^*) \quad , \quad VZ_2 = \text{sign}(\eta_B^* - \eta_A^*) \quad (4.27)$$

wobei die Funktion “sign” das Vorzeichen des Ausdrucks in der runden Klammer liefert. Wenn man Gleichung (4.26) etwas näher betrachtet, erkennt man, daß die Terme in den runden Klammern jeweils das arithmetische Mittel der akkumulierten Masse zweier Linien ist. Das bedeutet aber, daß man ebenso gut direkt die akkumulierte Masse an der Linie berechnen kann, die in der Mitte zwischen beiden liegt. In Abb. 4.8 ist die Fläche schraffiert über die effektiv integriert wird, weil das Viereck letztlich durch die schraffierte Fläche approximiert wird.

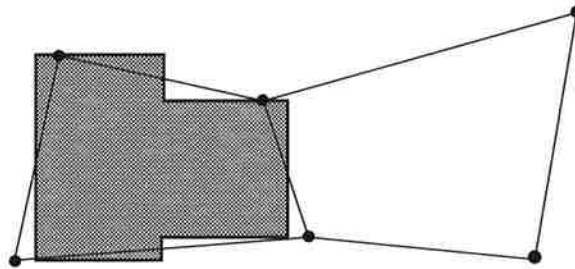


Abb. 4.8 Allgemeines Viereck und die dazugehörige Fläche durch die es approximiert wird.

Die Approximation ist natürlich um so besser, je weniger das Viereck deformiert ist, d.h. je glatter die Strömung ist. Da auch hier wieder die Beiträge einer Seite beim jeweils benachbarten Viereck mit entgegengesetztem Vorzeichen eingehen ist pro Gitterzelle nur die akkumulierte Masse von zwei Linien zu bestimmen.

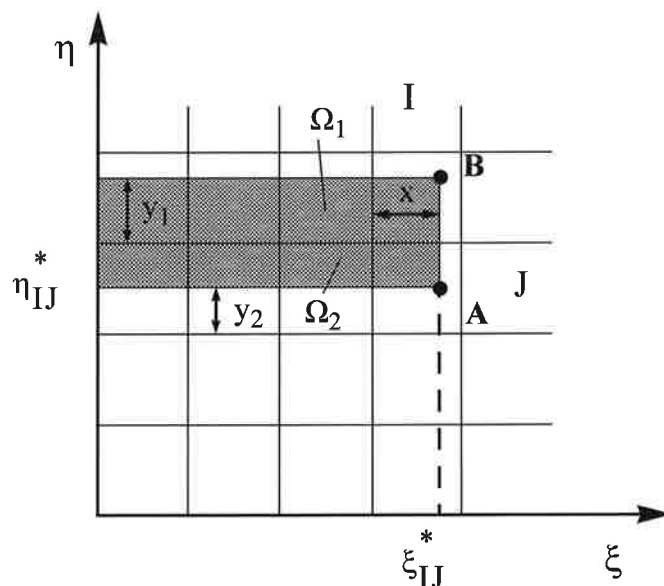


Abb. 4.9 Berechnung der akkumulierten Masse der Linie AB

Das Verfahren, die akkumulierte Masse einer Linie, deren Endpunkte nicht auf Gitterpunkten liegen, zu bestimmen, wird anhand von Abb. 4.9 erläutert. Die schraffierte Fläche ist die gesuchte akkumulierte Masse. Wenn diese sich in  $\eta$ -Richtung über zwei oder mehr Reihen erstreckt, ist eine getrennte Berechnung der Bereiche notwendig, es ist

$$m(\Omega_1) = \int_0^{y_1} (c_{I,J+1}y^2 + b_{I,J+1}y + a_{I,J+1})dy = \frac{1}{3}c_{I,J+1}y^3 + \frac{1}{2}b_{I,J+1}y^2 + a_{I,J+1}y. \quad (4.28)$$

Die Koeffizienten  $a_{I,J+1}$ ,  $b_{I,J+1}$  und  $c_{I,J+1}$  sind die Koeffizienten der Parabel, welche die Massenverteilung innerhalb  $\Omega_1$  bis zur Linie AB in  $\eta$ -Richtung beschreibt. Sie müssen zunächst mit (3.38) berechnet werden und die dabei verwendeten akkumulierten Massen sind durch

$$\sum_{i=1}^{I-1} \phi_{i,j} + \frac{1}{3}c_{Ij}x^3 + \frac{1}{2}b_{Ij}x^2 + a_{Ij}x, \quad j = J-1, \dots, J+3, \quad (4.29)$$

gegeben.  $a_{Ij}$ ,  $b_{Ij}$  und  $c_{Ij}$  sind jeweils die Koeffizienten der Parabel für die Verteilung der Masse in  $\xi$ -Richtung in der Gitterzelle  $(I,j)$ . Analog gilt für den Bereich  $\Omega_2$ ,

$$m(\Omega_2) = \int_{y_2}^1 (c_{IJ}y^2 + b_{IJ}y + a_{IJ})dy = \frac{1}{3}c_{IJ}y^3 + \frac{1}{2}b_{IJ}y^2 + a_{IJ}y \quad (4.30)$$

mit den akkumulierten Massen

$$\sum_{i=1}^{I-1} \phi_{i,j} + \frac{1}{3}c_{Ij}x^3 + \frac{1}{2}b_{Ij}x^2 + a_{Ij}x, \quad j = J-2, \dots, J+2. \quad (4.31)$$

Dieser Algorithmus kann derart programmiert werden, daß er alle möglichen Fälle erfaßt. Beim Beispiel in Abb. 4.9 liegen A und B, Anfangs- und Endpunkt der Linie, in benachbarten Zellen. Es kann natürlich ebenso sein, daß sie in die gleiche Zelle fallen bzw. daß eine oder mehrere Zellen dazwischenliegen.

Die in diesem Kapitel beschriebene Alternative, welche die Berechnung akkumulierter Massen von Linien parallel zur  $\eta$ -Achse als Grundlage hat kann prinzipiell ebenso mit akkumulierten Massen von Linien parallel zur  $\xi$ -Achse hergeleitet werden. Erstere hat allerdings einige Vorteile wenn man das Verfahren in sphärischen Koordinaten formuliert. In numerischen Modellen auf der Kugeloberfläche läuft die Lösung der verschiedenen Gleichungen im allgemeinen derart ab, daß sie vom Nordpol beginnend sukzessive für jeden Breitenkreis berechnet wird. Ein Gewinn dieser Methode ist das immer nur die Variablen



für einige wenige Breitenkreise im Hauptspeicher gehalten werden muß. Betrachtet man nun aber (4.31) für den Fall, daß die akkumulierte Masse einer Linie parallel zur  $\xi$ -Achse berechnet wird so bedeutet der erste Term, daß die Boxmittelmittelwerte für alle Breitenkreise vom Nordpol bis zur Box in der die Linie liegt benötigt werden, was nicht gewährleistet werden kann. Daher ist die in diesem Kapitel beschriebene Variante im Vorteil.

In Abb. 4.10 ist der Ablauf der einzelnen Teilschritte des Verfahrens noch einmal schematisch zusammengestellt. Das bisher entwickelte 2D-Verfahren hat den Vorteil, daß es ausschließlich mit eindimensionalen Operatoren (hier sind das die Integrationen) auskommt. Durch sukzessives Anwenden dieser Operatoren ist die eindimensionale Methode auf zwei Dimensionen erweitert worden. Das so gewonnene zweidimensionale Verfahren ist aber leider nicht mehr monoton oder positiv definit, selbst wenn die 1D-Operatoren dies einzeln jeweils erfüllen. Der Grund dafür ist wie folgt einzusehen: Um z.B. eine Funktion in  $\eta$ -Richtung zu berechnen, muß man zunächst fünf Integrationen in  $\xi$ -Richtung durchführen, wodurch automatisch die Variation der Masse entlang der Diagonalen mit ins Spiel gebracht wird. Diese Variation ist in  $\eta$ -Richtung aber nicht einheitlich und Eigenschaften wie Positivität oder Monotonie, die den Parabeln aufgeprägt werden, gelten dann nur bei Integration über eine ganze Zelle. Da man in der Praxis aber über Teilbereiche einer Gitterzelle integriert sind Monotonie oder Positivität der Lösung im beschriebenen zweidimensionalen Ansatz auf diese Weise nicht zu erreichen.

Erhebt man die Forderung nach Monotonie, ist es notwendig das etwas umfangreichere Konzept des "Fluß-korrigierten Transportes" von *Zaleszak (1979)* zu verfolgen, wie es zum Beispiel in der Arbeit von *Holm (1995)* geschieht. Eine andere Technik, die den Fluß einer Eigenschaft von einer Gitterzelle in die benachbarte begrenzt ist von *Thuburn (1996)* entwickelt worden. In den Experimenten dieser Arbeit wurde lediglich eine positiv definite Lösung verlangt, welches man im Nachhinein auf verschiedenen Wegen bewirken kann. Die einfachste Methode ist das sogenannte "hole-filling" bei dem die negativen Werte einiger Gitterpunkte durch die Masse an benachbarten Punkten aufgefüllt werden. Dieser Vorgang verletzt in keiner Weise die Massenerhaltung. Hier wurde ein lokales "hole-filling" benutzt, d.h. die Masse, die gebraucht wird, um einen negativen Wert auf Null zu heben, wird immer von Punkten aus einem lokal begrenzten Bereich genommen. Dieser Bereich wird aus denjenigen Gitterzellen gebildet, die in die Berechnung der Parabeln der in Frage kommenden Zelle involviert sind. Dadurch ist gewährleistet das in der Nachbarschaft negativer Werte immer genügend Masse vorhanden ist um die Lücke zu füllen, das Verfahren mithin lokal ist.

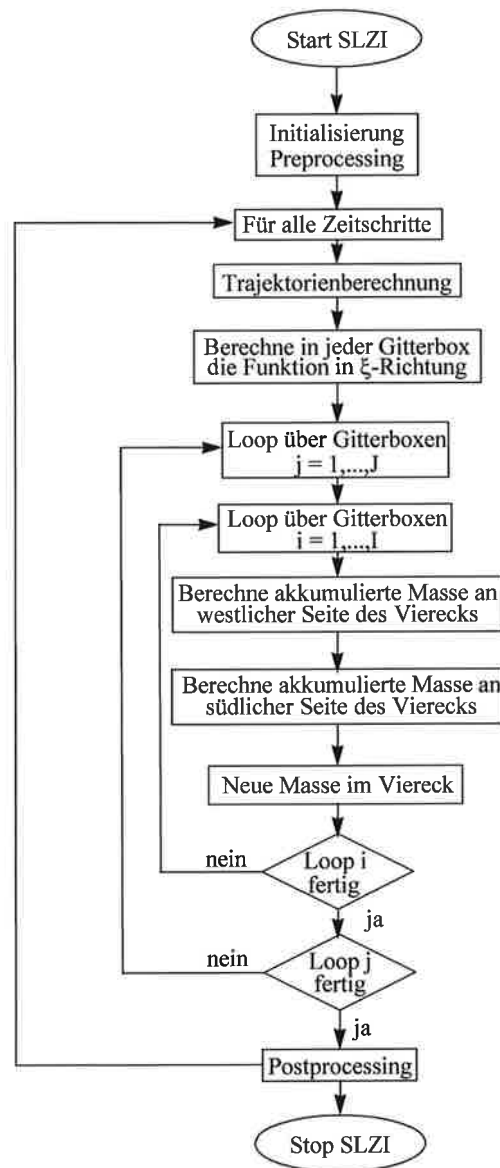


Abb. 4.10 Ablauf der verschiedenen Schritte beim Zellintegrationsverfahren in ebenen kartesischen Koordinaten.

#### 4.4 Ergebnisse am Beispiel des rotierenden Zylinders

Das 2D-Verfahren wird nun anhand eines bekannten Beispiels untersucht. Dabei handelt es sich um einen Zylinder, der um den Mittelpunkt eines gegebenen Gebietes rotiert. Das Integrationsgebiet sei  $80 \times 80$  Einheiten groß und die Gitterweite beträgt eine Einheit. Der Zylinder wird durch,

$$\phi(\xi, \eta) = \begin{cases} H, & r \leq R \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.32)$$

repräsentiert, R ist der Radius und H die Höhe des Zylinders. Es ist

$$r^2 = (\xi - \xi_0)^2 + (\eta - \eta_0)^2, \quad (4.33)$$

wobei  $(\xi_0, \eta_0)$  die Anfangskoordinaten der Zylindermitte sind. Die hier verwendeten geometrischen Parameter sind  $H=30$  und  $R=5$  und die Startkoordinaten sind  $(\xi_0, \eta_0)=(60,40)$ . In Abb. 4.11a ist der Zylinder im Ausgangszustand zu sehen.

Die Rotation erfolgt mit einer Winkelgeschwindigkeit von  $\omega = 0,3636 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  und der Zeitschritt beträgt 2700 s. Dies bedeutet eine maximale Courant-Zahl von 5,5 und 64 Zeitschritte für eine volle Umrundung. Die Komponenten des Geschwindigkeitsfeldes sind durch,

$$\vec{V}(\xi, \eta) = (u, v) = (\omega \xi, -\omega \eta) \quad (4.34)$$

gegeben,  $\vec{V}$  in (4.34) ist der Geschwindigkeitsvektor, der in diesem Beispiel divergenzfrei ist. Die Startpunkte der Trajektorien können hier analytisch berechnet werden. Für eine Trajektorie die am Gitterpunkt  $(I\Delta\xi, J\Delta\eta)$  endet, lautet der korrekte Startpunkt  $(\xi_*, \eta_*)$ , wie z.B. bei *McDonald (1984)* zu verfolgen ist

$$\xi_* = I\Delta\xi - \{u \sin \omega \Delta t + v(1 - \cos \omega \Delta t)\} / \omega \quad (4.35a)$$

$$\eta_* = J\Delta\eta - \{v \sin \omega \Delta t - u(1 - \cos \omega \Delta t)\} / \omega. \quad (4.35b)$$

Als Fehlermaß für die Abweichung der berechneten von der analytischen Lösung wird die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers, der sogenannte "root mean square error" (RMSE) angesehen.

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{K} \sum_k (\phi_k - \phi_k^{\text{true}})^2}. \quad (4.36)$$

Hierin ist K die Anzahl der Gitterpunkte,  $\phi_k$  die berechnete Lösung am Gitterpunkt k und  $\phi_k^{\text{true}}$  die "wahre" Lösung. Weiterhin wird das Maximum und das Minimum der berechneten Lösung sowie die mit der Anfangsmasse normierte Gesamtmasse des rotierenden Zylinders untersucht.

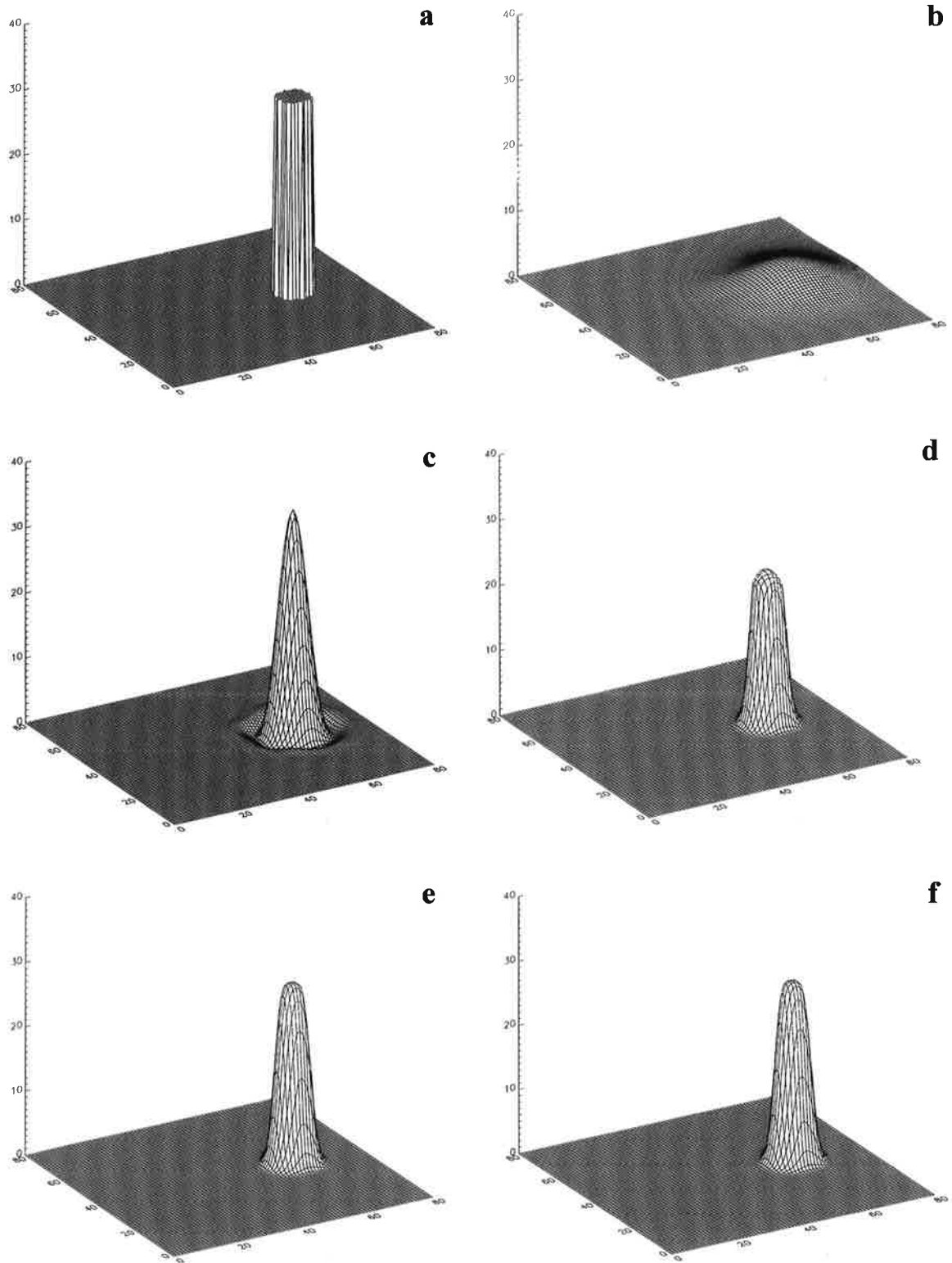
Bei den Experimenten wurde das SLZI-Verfahren wie in Kapitel 4.3 beschrieben, verwendet, d.h. zunächst Integration in  $\xi$ -Richtung und dann in  $\eta$ -Richtung. Es wurde je ein Experiment mit konstanten, linearen und quadratischen Funktionen durchgeführt mit der zusätzlichen Bedingung, daß die Lösung positiv definit sein soll.

|                           | MIN    | MAX    | RMSE  | TOTAL |
|---------------------------|--------|--------|-------|-------|
| initial                   | 0.000  | 30.000 | 0.000 | 1.000 |
| quadratisch               | 0.000  | 29.982 | 0.805 | 1.000 |
| linear                    | 0.000  | 23.156 | 1.269 | 1.000 |
| konstant                  | 0.000  | 8.049  | 2.122 | 1.000 |
| bikubisch                 | -1.251 | 34.519 | 1.249 | 0.987 |
| quadratisch <sup>-1</sup> | 0.000  | 29.984 | 0.802 | 1.000 |

Tab. 4.1 Ergebnisse der Experimente mit einem rotierenden Zylinder nach sechs vollen Umrundungen. Die Werte in der Tabelle sind jeweils dimensionslose Größen. Das Experiment mit der Bezeichnung "quadratisch<sup>-1</sup>" bedeutet umgekehrte Integrationsreihenfolge bezogen auf die anderen Fälle.

Als Vergleich dient ein Experiment mit semi-Lagrangischer bikubischer Interpolation. Schließlich wurde auch noch ein Experiment mit quadratischen Funktionen, aber umgekehrter Integrationsreihenfolge, d.h. zuerst in  $\eta$ -Richtung und dann in  $\xi$ -Richtung, aufgesetzt. Letztgenanntes Experiment bezeichne ich im folgenden mit "quadratisch<sup>-1</sup>". In Tabelle 4.1 sind die Ergebnisse nach sechs kompletten Umrundungen zusammengestellt und die Abbildungen 4.11b – 4.11f zeigen jeweils den Zylinder am Ende der sechs Runden.

Alle Experimente zeigen, daß wie beim semi-Lagrangischen Verfahren erwartet, die numerische Lösung auch bei Courantzahlen weit größer als eins, stabil ist. Für das in dieser Arbeit entwickelte SLZI-Verfahren war dieser Beweis noch zu erbringen. Beim Experiment mit konstanten Funktionen (b) kann man nach sechs Umläufen nicht mehr erkennen wie der Ausgangszustand ausgesehen hat. Das Profil ist über ein weites Gebiet verschmiert und die Höhe des Signals ist auf unter ein Drittel der ursprünglichen Höhe gesunken. Schaut man sich hingegen die linearen und quadratischen Funktionen (d)-(f) an ist eine deutliche Verbesserung zu erkennen. Die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers, ein Maß für die numerische Genauigkeit des Verfahrens, wird wie erwartet mit steigendem Grad der Funktionen kleiner und die Gestalt des Zylinders bleibt deutlicher zu sehen. Vergleicht man die SLZI-Experimente mit der bikubischen Interpolation (c), so ist der Tabelle zu entnehmen, daß die linearen Funktionen in etwa die gleiche formale Genauigkeit aufweisen. Der geringe Unterschied ist dadurch zu erklären, daß die linearen Funktionen der zusätzlichen Forderung einer positiv definite Lösung unterliegen, während dies bei (c) nicht der Fall ist.



**Abb. 4.11** Berechneter Zylinder nach 6 Umrundungen bei einem Zeitschritt von  $\Delta t=2700$  Sekunden für (b) konstante Fkt., (c) bikubische Interpolation, (d) lineare Fkt., (e) quadratische Fkt. und (f) quadratische Fkt. aber umgekehrte Integrationsreihenfolge als zuvor. Teilbild (a) zeigt schließlich den Ausgangszustand.

Das negative Minimum und ein Maximum größer als die ursprüngliche Höhe des Zylinders bei der bikubischen Interpolation sind auf das Über- bzw. Unterschwingen der numerischen Lösung zurückzuführen. Dies hat keine weitere Bedeutung, denn es läßt sich mit zusätzlichen Einschränkungen wie Positivität oder Monotonie beseitigen. Die Erhaltung der Gesamtmasse ist, wie erwartet, bei allen SLZI-Experimenten erfüllt, nur das Experiment mit bikubischer Interpolation hat am Ende einen leichten Massenverlust aufzuweisen. Weiterhin ist zu bemerken, daß die Reihenfolge der Integration keine Rolle spielt und beide Varianten zu ähnlichen Ergebnissen führen. Die Teilbilder (e) und (f) in Abb. 4.11 lassen keine Unterschiede erkennen und auch die numerischen Ergebnisse in Tab. 4.1 zeigen nur geringe Abweichungen voneinander.

Als Fazit läßt sich festhalten, daß die in Kapitel 4 vorgestellte Erweiterung des SLZI-Verfahrens auf zwei Dimensionen sinnvolle Ergebnisse liefert. Im Kern werden dabei sukzessive eindimensionale Integrale berechnet, die Bestandteile einer konservativen Abbildung des Eigenschaftsfeldes zwischen einem regelmäßigen und einem unregelmäßigen Gitter sind. Die in Kapitel 3 untersuchten Eigenschaften der Methode konnten auch in 2D-Experimenten bestätigt werden. Dabei ist das Verfahren symmetrisch bezüglich der Vertauschung der Integrationsreihenfolge, d.h. es ist egal ob zunächst in  $\xi$ -Richtung und dann in  $\eta$ -Richtung integriert wird oder umgekehrt. Vergleicht man es mit anderen weitverbreiteten semi-Lagrange-Verfahren wie z.B. der semi-Lagrangischen bikubischen Interpolation, erhält man bereits mit linearen Funktionen eine ähnliche numerische Genauigkeit aber der zusätzlichen Eigenschaft, daß die Gesamtmasse erhalten bleibt. Ein Verfahren höherer Ordnung ergibt sich durch quadratische Funktionen, die zwar einen höheren Aufwand bedeuten, aber durchweg verbesserte Resultate liefern.

Im nächsten Kapitel wird nun untersucht, wie sich das Verfahren auf die Kugelgeometrie übertragen läßt. Besondere Aufmerksamkeit wird dabei den Polen gewidmet, die eine gesonderte Behandlung erfahren.

## 5. Das Zellintegrationsverfahren auf der Kugel

Bei den Überlegungen das SLZI-Verfahren auf die Kugel zu übertragen sind zunächst einige Besonderheiten der Kugeloberfläche zu berücksichtigen. Für ein Gitterpunktsmodell gibt es auf der Kugeloberfläche zwei ausgezeichnete Punkte, wenn man ein Koordinatensystem aus Längengraden und Breitenkreisen zugrunde legt. Natürlicherweise bildet die Kugeloberfläche besonders für spektrale Modelle die idealen geometrischen Bedingungen. In diesen Modellen gehört zu den Spektralkoeffizienten einer Variablen immer ein entsprechendes Feld im Ortsraum  $(\lambda, \theta)$ . Die Koordinatenlinien des Ortsraumes bestehen aus Längengraden und Breitenkreisen und sie bilden das sogenannte Gaußsche Gitter. Dieses ist im folgenden gemeint, wenn von einem Gitter oder von Gitterpunkten die Rede ist. In diesem Gitter sind Nord- und Südpol ausgezeichnete Gitterpunkte, da dort alle Längengrade zusammenkommen und die Pole damit keine eindeutige Längenkoordinate haben. Der geringe Abstand der Längengrade und die große Krümmung der Koordinatenlinien in der Nähe des Pols sind ein weiteres Merkmal der Kugelgeometrie. Weiter unten wird genauer erläutert welche Auswirkungen das auf die Trajektorienberechnung und auf die konservative Abbildung hat.

Der in Kapitel 4 für ebene kartesische Koordinaten entwickelte Algorithmus ist zunächst relativ einfach auf Kugelkoordinaten zu übertragen. Das wird deutlich wenn man sich in Erinnerung ruft, daß Flächenintegrale Kernstück des Algorithmus sind. Integrale der Form

$$I = \int_{\delta A_{ij}^-} \phi_{ij}(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (5.1)$$

lauten in Kugelkoordinaten ausgedrückt,

$$\tilde{I} = \int_{\delta A_{ij}^-} \phi_{ij}(\lambda, \theta) \cos \theta d\theta d\lambda. \quad (5.2)$$

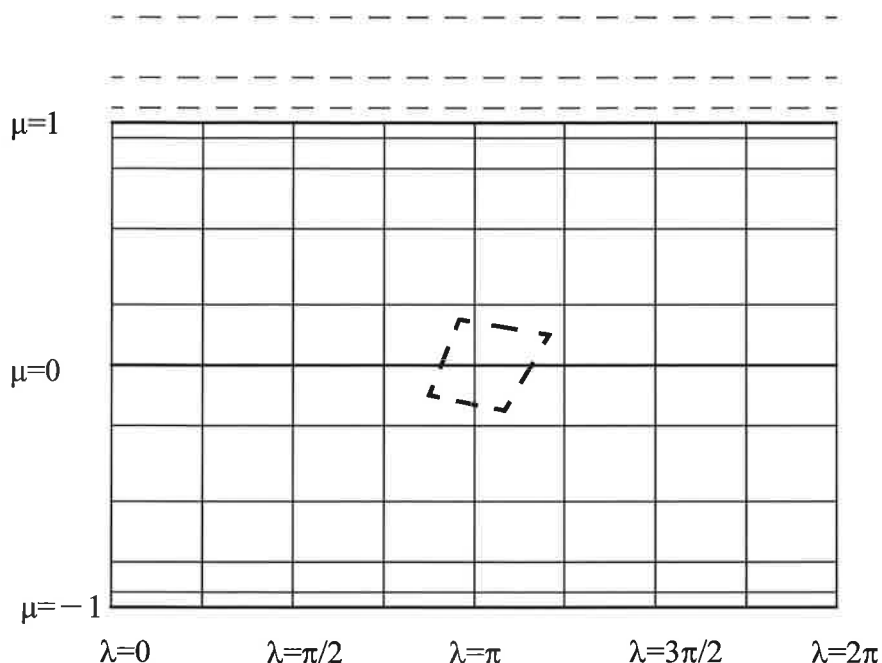
$\delta A_{ij}^-$  ist das Flächenstück, über das zu integrieren ist,  $\lambda$  ist die Längenkoordinate und  $\theta$  die Gaußsche Breite,  $I$  bzw.  $\tilde{I}$  sind Bezeichnungen für die entsprechenden Integrale. Verwendet man anstelle von  $\theta$  jedoch den Sinus der Breite,

$$\mu = \sin \theta \quad (5.3)$$

ergibt sich aus Gleichung (5.2)

$$\tilde{I} = \int_{\delta A_{ij}^-} \phi_{ij}(\lambda, \mu) d\mu d\lambda, \quad (5.4)$$

d.h. man hat eine formale Gleichheit mit (5.1) hergestellt und kann nun den gleichen Algorithmus verwenden. Das neue  $\lambda$ - $\mu$ -Koordinatensystem ist in Abb. 5.1 skizziert.



**Abb. 5.1** Skizze des  $\lambda$ - $\mu$ -Koordinatensystem, dünne senkrechte Linien sind Längengrade, waagerechte Linien sind Gaußsche Breitenkreise. Der Äquator ( $\mu=0$ ) und der Nordpol ( $\mu=1$ ) sind etwas stärker hervorgehoben.

In der Skizze sind exemplarisch einige Koordinatenlinien eingezeichnet. Die Linien  $\mu=1$  bzw.  $\mu=-1$  repräsentieren den Nord- bzw. Südpol, die ebenso mehrdeutig bzgl. der Längengraden sind wie im  $\lambda$ - $\theta$ -Koordinatensystem auch. Die Seiten des eingezeichneten Vierecks werden als gerade Linien angenommen analog zu den Verhältnissen in kartesischen Koordinaten. Diese Annahme ist aber in der Nähe der Pole nicht mehr ausreichend gerechtfertigt, was in einem späteren Teilkapitel noch genauer untersucht wird.

Führt man die Analogie zu kartesischen Koordinaten fort muß noch ein weiterer Aspekt betrachtet werden. Die Gleichungen zur Berechnung von Parabeln in Kapitel 3 gingen von einem äquidistanten Gitter aus was insbesondere bei der Herleitung von (3.39) eine Rolle spielt. Die  $\mu$ -Koordinaten auf der Kugel sind aber nicht äquidistant was nun berücksichtigt werden muß. Führt man die Berechnungen in Anhang A, die als Resultat (3.39) ergeben, für ein nicht-äquidistantes Gitter durch, erhält man, wie z.B. bei *Collela und Woodward (1984)* nachzulesen ist, den etwas umfangreicheren Ausdruck:



$$\phi_{k+1/2} = \phi_k + \frac{\Delta\xi_{k+1}}{\Delta\xi_k + \Delta\xi_{k+1}}(\phi_{k+1} - \phi_k) + \frac{1}{\sum_{j=-1}^2 \Delta\xi_{k+j}} \left\{ \frac{(2\Delta\xi_{k+1}\Delta\xi_k)}{(\Delta\xi_k + \Delta\xi_{k+1})} \right. \\ \left. \left[ \frac{\Delta\xi_{k-1} + \Delta\xi_k}{2\Delta\xi_k + \Delta\xi_{k+1}} - \frac{\Delta\xi_{k+2} + \Delta\xi_{k+1}}{2\Delta\xi_{k+1} + \Delta\xi_k} \right] (\phi_{k+1} - \phi_k) \right. \\ \left. - \Delta\xi_k \frac{\Delta\xi_{k-1} + \Delta\xi_k}{2\Delta\xi_k + \Delta\xi_{k+1}} \delta\phi_{k+1} + \Delta\xi_{k+1} \frac{\Delta\xi_{k+2} + \Delta\xi_{k+1}}{2\Delta\xi_{k+1} + \Delta\xi_k} \delta\phi_k \right\} \quad (5.5)$$

mit

$$\delta\phi_k = \frac{\Delta\xi_k}{\Delta\xi_{k-1} + \Delta\xi_k + \Delta\xi_{k+1}} \left[ \frac{2\Delta\xi_{k-1} + \Delta\xi_k}{\Delta\xi_{k+1} + \Delta\xi_k} (\phi_{k+1} - \phi_k) + \frac{\Delta\xi_k + 2\Delta\xi_{k+1}}{\Delta\xi_{k-1} + \Delta\xi_k} (\phi_k - \phi_{k-1}) \right]. \quad (5.6)$$

Obwohl diese Gleichungen recht kompliziert aussehen ist die Berechnung nicht sehr viel aufwendiger als im Fall des äquidistanten Gitters. Da sich das Gitter mit der Zeit natürlich nicht ändert muß man die meisten Faktoren nur einmal vor Beginn der Zeitschleife berechnen und kann sie dann als Konstante verwenden. Um die Beziehungen auch in Polnähe in  $\mu$ -Richtung benutzen zu können, erweitert man das Gitter über den Pol hinaus um die notwendigen Punkte. Das ist in Abb. 5.1 am Nordpol durch gestrichelte Linien angedeutet.

## 5.1 Trajektorienberechnung auf der Kugel

In den meisten semi-Lagrangischen Modellen werden die Trajektorien linear approximiert. Durch diesen Ansatz werden die Trajektorien durch Geraden dargestellt, was in kartesischen Koordinaten auch eine gute Näherung ist. Da ist es naheliegend auf der Kugel direkt in  $(\lambda, \theta)$ -Koordinaten zu arbeiten, um die Winkeländerungen  $(\Delta\lambda, \Delta\theta)$  innerhalb eines Zeitschritts zu berechnen,

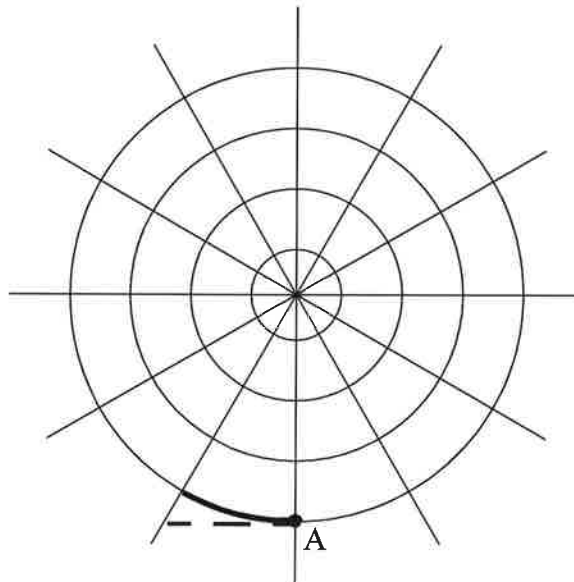
$$\Delta\lambda = 2\Delta t \frac{d\lambda}{dt} + O(\Delta t^2) \quad (5.7a)$$

$$\Delta\theta = 2\Delta t \frac{d\theta}{dt} + O(\Delta t^2) \quad (5.7b)$$

mit

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{u(\lambda(t), \theta(t))}{a \cdot \cos(\theta(t))}, \quad \frac{d\theta}{dt} = \frac{v(\lambda(t), \theta(t))}{a}. \quad (5.8a,b)$$

u bzw. v ist die zonale bzw. meridionale Komponente der Geschwindigkeit und a ist der Erdradius. Diese Gleichungen würden bedeuten, daß Trajektorien auf der Kugel, durch gerade Linien im  $(\lambda, \theta)$ -Raum dargestellt werden, was aber in Polnähe eine schlechte Lösung ist. In Abb. 5.2 ist eine Situation skizziert, die das verdeutlicht.

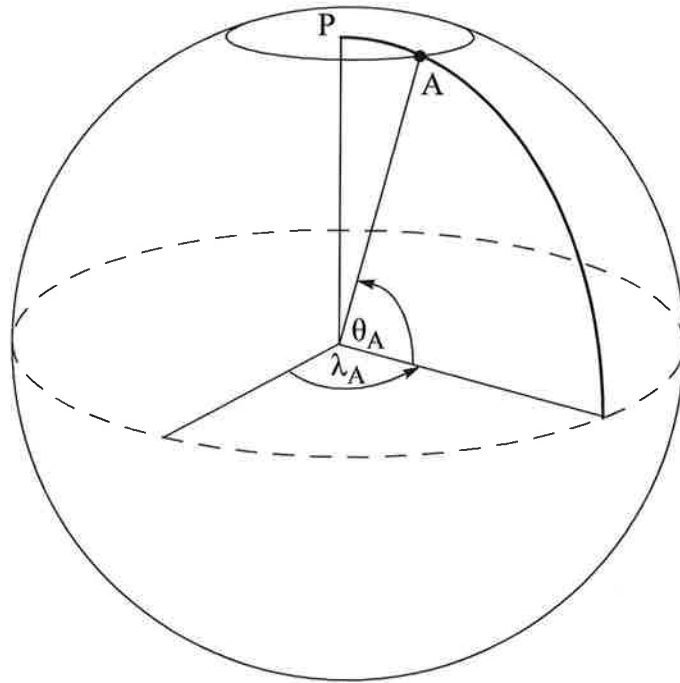


**Abb. 5.2** Trajektorie an einem Breitenkreis in der Nähe des Pols die im Punkt A endet.

Die Kreise stellen einige Breitenkreise rund um den Pol dar und die radialen Linien die Meridiane. Betrachtet man nun Punkt A mit den Koordinaten  $(\lambda_A, \theta_A)$  der Endpunkt einer Trajektorie ist. Ist z.B.  $v(\lambda, \theta) = 0$ , dann ist die Tangente an den Breitenkreis in A eine gute Wahl für die tatsächliche Trajektorie, in Abb. 5.2 als gestrichelte Linie dargestellt. Aus (5.7) würde man als Trajektorie hingegen das in der Abbildung durchgezogene Bogenstück erhalten. Um die falsche Berechnung der Trajektorien in Polnähe zu verhindern wird eine Methode benutzt, die z.B. bei *Ritchie (1986)* oder *McDonald und Bates (1989)* beschrieben ist.

Für jeden polnahen Punkt A, der im  $(\lambda, \theta)$ -Koordinatensystem die Koordinaten  $(\lambda' = \lambda_A, \theta' = \theta_A)$  hat, wird ein Hilfskoordinatensystem  $(\lambda', \theta')$  eingeführt, so daß der Punkt A in diesem die neuen Koordinaten  $(\lambda' = 0, \theta' = 0)$  besitzt. Das Hilfskoordinatensystem kann

man durch zwei aufeinanderfolgende Rotationen um die Winkel  $\lambda_A$  und  $\theta_A$  erzeugen. In Abb. 5.3 sind die Verhältnisse graphisch dargestellt.



**Abb. 5.3** Das Hilfskoordinatensystem ( $\lambda', \theta'$ ) am Punkt A wird durch Rotation des geographischen Systems ( $\lambda, \theta$ ) um die Winkel  $\lambda_A$  und  $\theta_A$  erzeugt.

Führt man diese Rotationen formal durch (siehe z.B. bei *McDonald und Bates (1989)* im Appendix A) so erhält man folgende Beziehung zwischen den Koordinaten beider Systeme,

$$\cos\theta' \cos\lambda' = \cos\theta \cos(\lambda - \lambda_A) \cos\theta_A + \sin\theta \sin\theta_A \quad (5.9a)$$

$$\cos\theta' \sin\lambda' = \cos\theta \sin(\lambda - \lambda_A) \quad (5.9b)$$

$$\sin\lambda' = \sin\theta \cos\theta_A - \cos\theta \cos(\lambda - \lambda_A) \sin\theta_A. \quad (5.9c)$$

oder die inversen Formeln für  $\lambda$  und  $\theta$ ,

$$\lambda = \lambda_A + \text{atan} \left[ \frac{\cos\theta' \sin\lambda'}{\cos\theta' \cos\lambda' \cos\theta_A - \sin\theta' \sin\theta_A} \right] \quad (5.10a)$$

$$\theta = \text{asin} [\cos\theta' \cos\lambda' \sin\theta_A + \sin\theta' \cos\theta_A]. \quad (5.10b)$$

Aus (5.9a)-(5.9c) kann man weiterhin ableiten (McDonald und Bates (1988), Appendix A), daß die Geschwindigkeitskomponenten in beiden Koordinatensystemen durch folgende Gleichung verknüpft sind,

$$\begin{bmatrix} u' \\ v' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G & -S \\ S & G \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

wobei

$$G = [\cos\theta \cos\theta_A + \sin\theta \sin\theta_A \cos(\lambda - \lambda_A)] / \cos\theta' \quad (5.12)$$

und

$$S = \sin\theta_A \sin(\lambda - \lambda_A) / \cos\theta'. \quad (5.13)$$

Am Punkt A ist  $G=1$  und  $S=0$ , d.h.  $(u',v')_A=(u,v)_A$ . Da die Krümmung der Koordinatenlinien in der Umgebung von im  $(\lambda',\theta')$ -System genügend klein ist, kann dort nun (5.7) und (5.8) zur genauen Berechnung des Startpunktes  $(\lambda_*', \theta_*')$  der Trajektorie die in A endet verwendet werden. Aus  $(\lambda_*', \theta_*')$  erhält man dann mit (5.10) den Startpunkt der Trajektorie im  $(\lambda,\theta)$ -System. Es ergibt sich

$$\lambda_*' = - \left( \frac{\bar{u}'}{a \cos\theta'} \right) 2\Delta t \quad (5.14a)$$

$$\theta_*' = - \left( \frac{\bar{v}'}{a} \right) 2\Delta t \quad (5.14b)$$

wobei  $(\bar{\quad})$  ein zeitliches und räumliches Mittel entlang der Trajektorie ist, welches in einem iterativen Prozeß bestimmt wird, der folgendermaßen abläuft:

- (a) Erste Iteration mit  $(\bar{u}', \bar{v}') = (u', v')_A$  was nach (5.11) gleich  $(u, v)_A$  ist.
- (b) Ersetze  $2\Delta t$  durch  $\Delta t$  in (5.14) um den Mittelpunkt der Trajektorie im  $(\lambda', \theta')$ -System zu erhalten.
- (c) Rücktransformation der Koordinaten des Mittelpunktes ins  $(\lambda, \theta)$ -System mit Gleichung (5.10).
- (d) Interpolation von  $(u, v)_A$  am Mittelpunkt im  $(\lambda, \theta)$ -System ergibt  $(u, v)_M$ .
- (e) Transformation von  $(u, v)_M$  ins  $(\lambda', \theta')$ -System mit (5.11) um  $(\bar{u}', \bar{v}')_M$  im zweiten Iterationschritt zu verwenden.

Dieses Verfahren der Trajektorienbestimmung auf der Kugel wird auch im "Integrated forecasting system"-Modell (IFS-Modell) des EZMWF verwendet. Zum IFS-Modell, welches

bei den Berechnungen in diesem Kapitel benutzt wurde folgen im Anhang C einige Erläuterungen.

Da für die SLZI-Methode die Trajektorien an den Eckpunkten der Gitterzellen berechnet werden, muß noch erklärt werden wie der Startpunkt der Trajektorie die am Pol endet, ermittelt wird. Dazu wird angenommen, daß in der unmittelbaren Umgebung des Pols der Windvektor konstant ist. An jedem Punkt in dieser Umgebung gilt dann für die Komponenten,

$$u_P = V_P \sin(\lambda - \lambda_0) \quad (5.15a)$$

$$v_P = V_P \cos(\lambda - \lambda_0) \quad (5.15b)$$

wobei  $V_P$  der Betrag des Windes ist und  $\lambda_0$  der Längengrad aus dessen Richtung der Wind zum Pol weht. Gleichung (5.15b) ist aber die erste Fourierkomponente von  $v$  zur Zeit  $t$  an den polnächsten Gitterpunkten. Das bedeutet,

$$V_P = (a + b)^{1/2} \quad (5.16)$$

$$\lambda_0 = \text{atan}(b/a) \quad (5.17)$$

mit

$$a = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N v^n(\lambda_i, \frac{\pi}{2} - \Delta\theta) \cos \lambda_i \quad (5.18a)$$

$$b = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N v^n(\lambda_i, \frac{\pi}{2} - \Delta\theta) \sin \lambda_i. \quad (5.18b)$$

Der Startpunkt der Trajektorie am Nordpol  $(\lambda_*, \theta_*)_{NP}$  ist demnach,

$$\lambda_* = \text{atan}(b/a), \quad \theta_* = \frac{\pi}{2} - \frac{V_P 2\Delta t}{a}. \quad (5.19a,b)$$

Entsprechende Überlegungen für den Südpol ergeben,

$$\lambda_* = \pi + \text{atan}(b/a) \quad (5.20a)$$

$$\theta_* = -\frac{\pi}{2} + \frac{V_P 2\Delta t}{a}. \quad (5.20b)$$

Damit sind nun alle notwendigen Gleichungen zur Berechnung von Trajektorien auf der Kugel aufgeführt. Im folgenden Teilkapitel wird nun ein Testproblem zur 2D-Advektion auf der Kugeloberfläche genauer untersucht.

## 5.2 Advektion über den Pol

Das in diesem Kapitel beschriebene Experiment kann man zurecht als Standardtest für die Entwicklung numerischer Verfahren in Kugelgeometrie ansehen. Es ist der Transport einer kosinusförmigen Glockenfunktion über den Pol mittels eines divergenzfreien Windfeldes. Bei *Williamson et al.* (1992) ist dies der Testfall 1. Die Glockenfunktion vollführt dabei eine komplette Umrundung der Erdkugel und überquert dabei direkt den Nord- bzw. Südpol. Der Anfangszustand der Funktion wird durch

$$\phi(\lambda, \theta) = \begin{cases} (\phi_0/2)(1 + \cos(\pi r/R)) & r < R \\ 0 & r \geq R \end{cases} \quad (5.21)$$

beschrieben. Die maximale Anfangshöhe der Funktion ist  $\phi=1000$ , dessen Radius  $R=a/3$  und  $r$  ist der Großkreisabstand zwischen einem beliebigen Punkt  $(\lambda, \theta)$  und dem Anfangsmittelpunkt der Funktion, der bei  $(\lambda_C, \theta_C)=(3\pi/2, 0)$  liegt. Der Abstand  $r$  wird durch,

$$r = a \cos[\sin \theta_C \sin \theta + \cos \theta_C \cos \theta \cos(\lambda - \lambda_C)] \quad (5.22)$$

berechnet, wobei  $a=6,37122 \cdot 10^6$  m der Erdradius ist. Das transportierende Windfeld ist

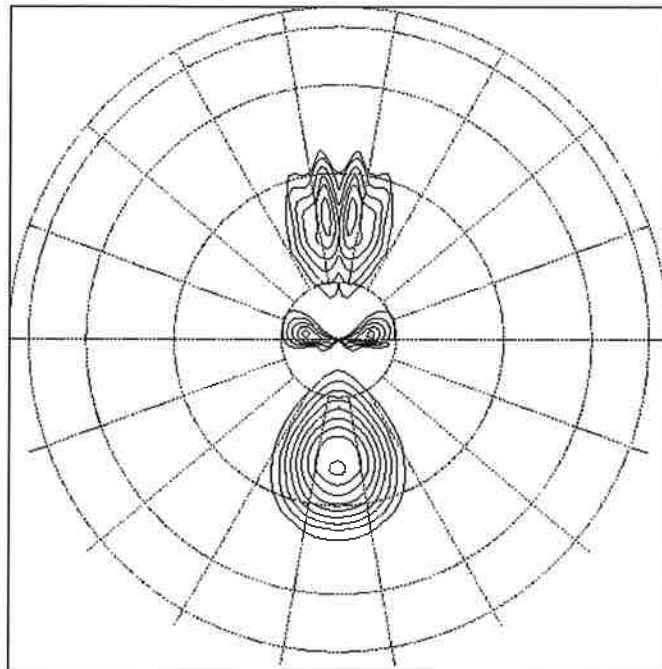
$$u = u_0(\cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \cos \lambda \sin \alpha) \quad (5.23a)$$

$$v = -u_0 \sin \lambda \sin \alpha \quad (5.23b)$$

mit  $u_0=2\pi a/(12 \text{ Tage})$  was ungefähr 40 m/s bedeutet.  $\alpha$  ist der Winkel zwischen der Achse der Rotation und der Erdachse. Wählt man z.B.  $\alpha=\pi/2$ , erfolgt die Advektion direkt über den Pol. Die Kosinus-Glockenfunktion wird in diesem Windfeld ohne Änderung der Gestalt transportiert.

Als erstes steht das Verhalten der SLZI-Methode beim Transport über den Nordpol im Mittelpunkt der Untersuchung. Dazu wird das eben beschriebene Experiment durchgeführt und die Gestalt der Kosinus-Glockenfunktion kurz vor und kurz nach der Überquerung des Nordpols analysiert. Eine detaillierte Fehlerechnung wird zunächst noch nicht durchgeführt. Die spektrale Auflösung des Modells beträgt T42 was einem zugehörigen Gaußschen Gitter von 128x64 Punkten entspricht. Der Zeitschritt beträgt  $\Delta t=4050$  Sekunden, d.h. 256 Zeit-

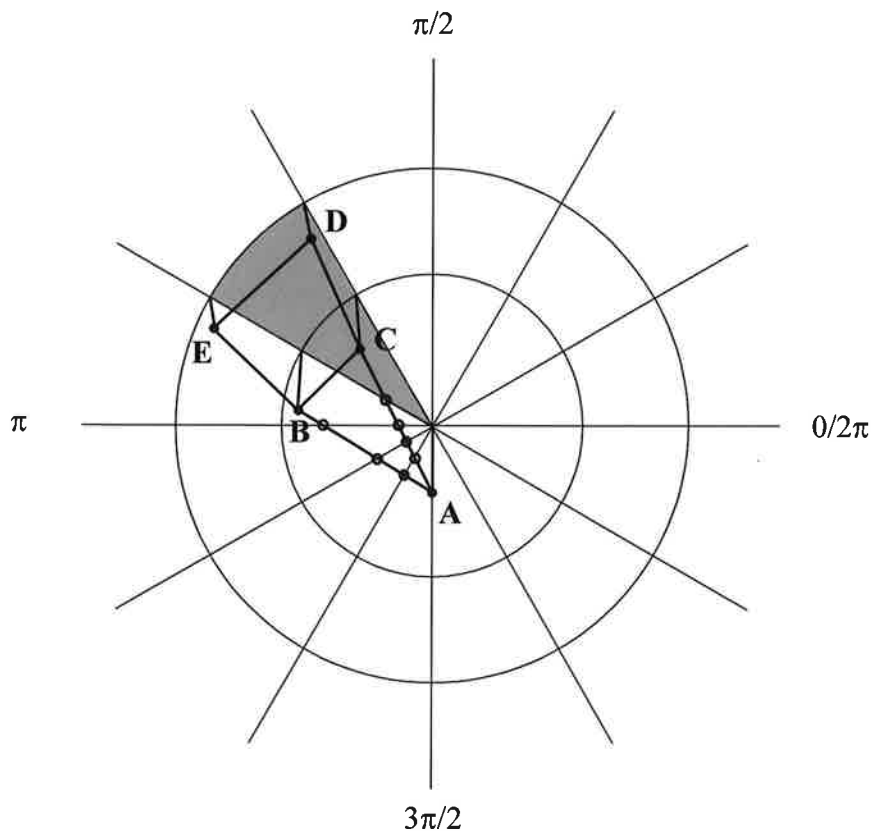
schritte sind für eine volle Umrundung notwendig. In Abb. 5.4 sind die Konturlinien der Funktion vor bzw. nach der Überquerung des Nordpols zu sehen.



**Abb. 5.4** Konturlinien der Kosinus-Glockenfunktion vor (unten im Bild) und nach (oben im Bild) Überquerung des Nordpols. Die Konturlinien haben einen Abstand von 100 und die niedrigste eingezeichnete Linie liegt bei 100.

Im unteren Teil von Abb. 5.4 sind die Konturen einige Zeitschritte vor der Überquerung des Nordpols zu sehen. Die dem Pol zugewandte Seite zeigt schon eine deutliche Abweichung der Konturlinien von der Kreisform, aber insgesamt ist die Form der Kosinus-Glockenfunktion noch zufriedenstellend. Einige Zeitschritte nach Passieren des Nordpols ist das Bild ziemlich verzerrt. Es scheint fast eine Aufspaltung des Musters in zwei verschiedene Hälften stattgefunden zu haben, zumindest kann man deutlich zwei verschiedene Maxima erkennen die symmetrisch angeordnet sind. Darüber hinaus scheint der Transport noch nicht vollständig abgeschlossen zu sein, da direkt über dem Pol eine weitere Struktur zu sehen ist, wenn auch nicht ganz so stark ausgeprägt. Wie in den einleitenden Bemerkungen zu Beginn dieses Kapitels erwähnt, hat man am Pol die besondere Situation daß die Koordinatenlinien stark gekrümmt sind und die Längengrade einen kleinen Abstand von einander haben. Unter diesen Verhältnissen scheint das SLZI-Verfahren am Pol verfälschte Ergebnisse zu liefern. Es ist allerdings erwähnenswert, daß die Erhaltung der Masse in diesem Experiment erfüllt war. Eine mögliche Erklärung für die verzerrte Lösung ist die starke Krümmung der Koordinatenlinien in Polnähe, die zu einer verfälschten Berechnung der

Flächenintegrale führen kann. Mit Hilfe von Abb. 5.5, einer polarstereographischen Ansicht wird dies an einem einfachen Beispiel erläutert.

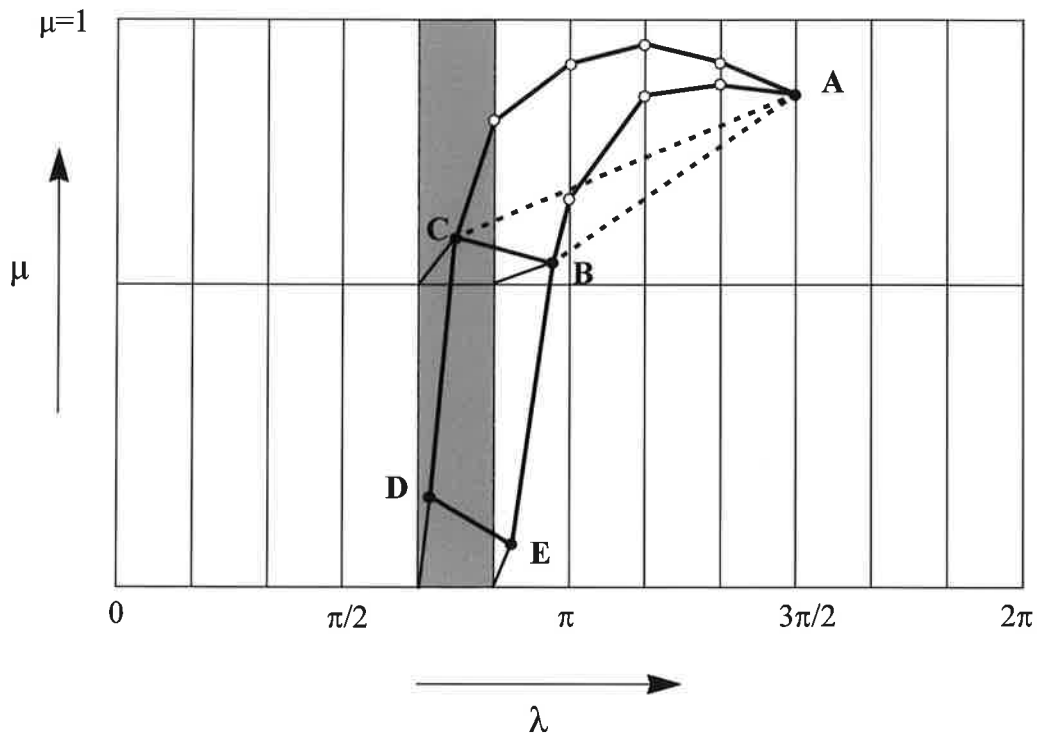


**Abb. 5.5** Illustration des SLZI-Verfahrens anhand einer Gitterzelle in der Nähe des Pols. Die schraffierten Flächen zeigen zwei Zellen zum Zeitpunkt  $t+\Delta t$ , welche zum Zeitpunkt  $t-\Delta t$  das Dreieck ABC bzw. das Viereck BCDE bilden. Die dünnen Linien deuten die Trajektorien an, deren Startpunkte mit A, B, C, D und E bezeichnet sind.

Die Kreise in der Abbildung stellen die Gaußschen Breiten dar und die radialen Linien die Längengrade. Exemplarisch sind zwei Gitterzellen des regelmäßigen Gitters grau hervorgehoben, eine dreieckige Zelle, die als einen Eckpunkt den Pol besitzt und die einen Breitenkreis weiter südlich angrenzende Zelle. Die Startpunkte der Trajektorien die an den Eckpunkten dieser Zellen enden, sind durch kleine ausgefüllte Kreise dargestellt und mit den Buchstaben A, B und C für die dreieckige Zelle, sowie B, C, D und E für die zweite Zelle bezeichnet. Die durchgezogene Linie beschreibt dementsprechend das Viereck bzw. Dreieck welches durch die Startpunkte zum Zeitpunkt  $t-\Delta t$  gebildet wird. Die dünnen Linien sollen die Trajektorien andeuten. Schließlich sind noch eine Reihe offener Kreise in der Abbildung zu sehen und zwar genau an den Stellen, an denen die Seiten des Dreiecks



mit den Längenkreisen einen Schnittpunkt bilden. Man sieht, daß eine einzelne Seite eine erhebliche Anzahl an Längenkreisen schneidet, was aufgrund des geringen Abstands der Meridiane in Polnähe nicht verwunderlich ist. Die gleiche Situation ist in Abb. 5.6 nun noch einmal in einem  $\lambda$ - $\mu$ -Diagramm dargestellt.



**Abb. 5.6** Situation wie in Abb.5.5, diesmal als  $\lambda$ - $\mu$ -Diagramm. Zusätzlich sieht man als dicke gestrichelte Linien die Verbindungslinien AB und AC.

Wenn man die Startpunkte der Trajektorien von den vier bzw. drei Ecken einer Gitterzelle ermittelt hat legen diese das Viereck oder Dreieck fest über das zu integrieren ist. Die Seiten des Vierecks oder Dreiecks sind, wie in der Beschreibung des Algorithmus dargelegt wurde, gerade Linien im  $\lambda$ - $\mu$ -Diagramm analog zu den Linien in ebenen kartesischen Koordinaten. Die geraden Linien sind in guter Näherung Bögen von Großkreisen. Diese Wahl ist auch ausreichend genau solange man genügend weit vom Pol entfernt ist. In Abb. 5.6 sind die Seiten eines Dreiecks eingezeichnet, das den Pol als Eckpunkt besitzt. Schaut man insbesondere auf die Seiten AB und AC welche im Bild durch dick gepunktete Linien angedeutet sind erkennt man, daß die geraden Linien den Verlauf der Seiten wie sie in der stereographischen Projektion zu sehen sind, völlig unzureichend wiedergeben. Beim Blick auf die Schnittpunkte der Dreiecksseiten mit den Längenkreisen wird dies ganz deutlich: Der Schnittpunkt der Seite AC mit dem Längenkreis  $8\pi/6$  liegt in Abb. 5.5 deutlich näher am Pol als der Punkt A selbst. Die Schnittstelle der dick gepunktete Linie AC mit  $\lambda=8\pi/6$  in

Abb. 5.6 liegt aber weiter vom Pol ( $\mu=1$ ) entfernt als A. Berücksichtigt man also die korrekten Schnittpunkte der Dreieckseiten mit den Meridianen, die zwischen A und beispielsweise C liegen, ergibt sich die korrekte Fläche über die in diesem Beispiel integriert werden muß. Die dick durchgezogenen Polygonzüge, die durch A, B, C und die Schnittpunkte festgelegt sind werden durch die Meridiane in einzelne Teilabschnitte unterteilt so daß der Beitrag der Seiten AB und AC zur Masse im Dreieck ABC, siehe Gleichung (4.16), durch die Summe der Beiträge der Teilabschnitte zustande kommt. Um diese berechnen zu können sind neben den bekannten Koordinaten der Startpunkte der Trajektorien auch noch die Koordinaten der erwähnten Schnittpunkte notwendig.

### 5.3 Die Berechnung der Schnittpunkte

Unter der Annahme, daß die Seiten des Dreiecks Bogenstücke von Großkreisen sind, reduziert sich das Problem auf die Bestimmung des Schnittpunktes zweier Großkreise, da die Längengrade ebenfalls Großkreise sind. Zwei voneinander verschiedene Großkreise schneiden sich in genau zwei Punkten und wenn keiner der Kreise der Äquator ist, liegt einer der Schnittpunkte auf der Nordhalbkugel und der andere auf der Südhalbkugel. In der vorliegenden Aufgabe ist es relativ einfach den in Frage kommenden Schnittpunkt zu finden, wenn man in der Nähe des Nordpols arbeitet ist es derjenige auf der Nordhalbkugel und umgekehrt. Legt man nun durch die Großkreise eine Ebene so braucht man einen Punkt und zwei linear unabhängige Richtungsvektoren um diese eindeutig festzulegen. Zunächst einmal betrachtet man die Normalenvektoren auf der Ebene, die in Abbildung 5.7 im Teilbild a mit  $\vec{n}_0$  und  $\vec{n}_1$  bezeichnet sind.

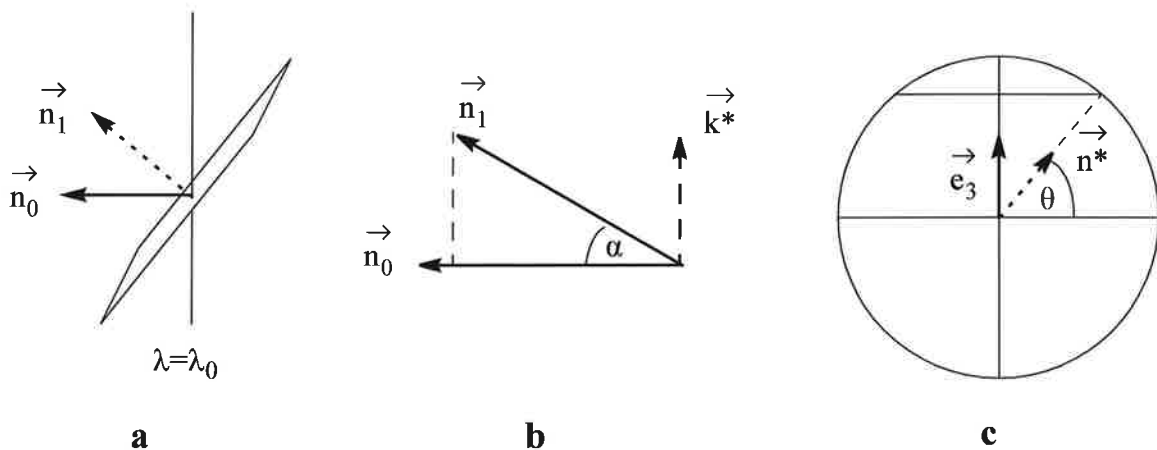


Abb. 5.7 Hilfsskizze zur Berechnung des Schnittpunktes zweier Großkreise. (a) Ebenen im Raum mit Normalenvektor (b) senkrechte Komponente von  $\vec{n}_1$  (c)  $\theta$ - bzw.  $\mu$ -Koordinate des Schnittpunktes zwischen den zwei Großkreisen.

Die senkrechte Linie in Teilbild (a) mit der Beschriftung  $\lambda=\lambda_0$  ist die Ebene durch den Längengrad  $\lambda_0$  mit dem Normalenvektor  $\vec{n}_0$ . Die Ebene mit dem Normalenvektor  $\vec{n}_1$  legt den zweiten Großkreis fest. Während  $\vec{n}_0$  in diesem Beispiel in der Bildebene liegt zeigt  $\vec{n}_1$  in die Bildebene hinein. In Teilbild (b) wo im wesentlichen der Bezug zwischen  $\vec{n}_0$ ,  $\vec{n}_1$  und dem neu eingeführten Vektor  $\vec{k}^*$  aufgezeigt wird, liegt die Betrachtungsebene nun in der von den Normalenvektoren aufgespannten Ebene. Im dritten Teilbild schließlich soll verdeutlicht werden, daß sich die  $\theta$ - oder  $\mu$ -Koordinate des Schnittpunktes unmittelbar aus  $\vec{n}^*$  und dem kartesischen Einheitsvektor in z-Richtung bestimmen läßt. Die  $\lambda$ -Koordinate des Schnittpunktes ist trivial, sie ist einfach gleich  $\lambda_0$ . Die einzelnen Schritte sind also wie folgt,

- bestimme die Normalenvektoren  $\vec{n}_0$  und  $\vec{n}_1$
- $\cos\alpha = \vec{n}_0 \cdot \vec{n}_1$
- $\vec{k}^* = \vec{n}_1 - \cos\alpha \cdot \vec{n}_0$
- Normiere  $\vec{k}^*$  auf die Länge 1:  $\vec{n}^* = \frac{\vec{k}^*}{|\vec{k}^*|}$
- $\cos\theta = \sqrt{1 - \mu^2} = \vec{n}^* \cdot \vec{e}_3$ .

Der erste Schritt, die Bestimmung der Normalenvektoren auf den Ebenen bedarf noch der näheren Erläuterung. Wie zu Beginn des Kapitels erwähnt sind ein Punkt  $\vec{s}$  und zwei linear unabhängige Richtungsvektoren  $\vec{p}$  und  $\vec{q}$ , die in der Ebene liegen zur eindeutigen Bestimmung einer Ebene im Raum notwendig. Die Parameterform einer Ebene lautet dann,

$$\vec{r} = \vec{s} + \alpha \vec{p} + \beta \vec{q} \quad (5.24)$$

$\vec{r}$  ist dabei ein beliebiger Punkt der Ebene,  $\alpha$  und  $\beta$  durchlaufen unabhängig voneinander reelle Zahlen. Der Vektor  $\vec{p} \times \vec{q}$  steht senkrecht auf der Ebene und nach der Normierung auf den Betrag eins ist der Normalenvektor auf die Ebene gefunden. Da beide Großkreise durch den Mittelpunkt der Kugel gehen ist der Aufpunkt  $\vec{s} = \vec{0}$  zu wählen. Der erste Großkreis  $G_1$  ist ein Längengrad und enthält folglich den Nord- bzw. Südpol als Punkt. Ferner kreuzt er den Äquator, was die Wahl der folgenden Richtungsvektoren nahelegt

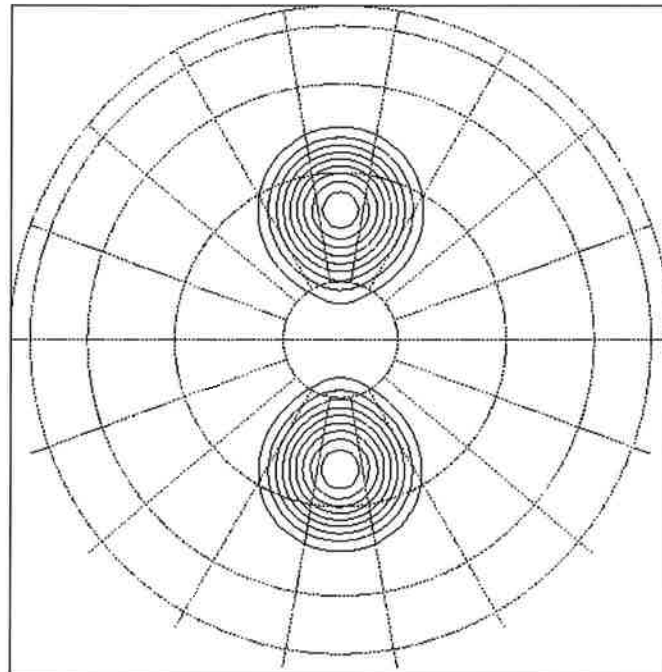
$$\vec{p}_{G1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{q}_{G1} = a \begin{pmatrix} \cos\lambda_0 \\ \sin\lambda_0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Der zweite Großkreis G2 enthält ebenfalls zwei markante und bekannte Punkte. Den Startpunkt der Trajektorie die am Pol endet und den Startpunkt der Trajektorie die im Punkt A von Abb. 5.6 endet. Die Koordinaten dieser Punkte  $(\lambda, \theta)_A$  bzw.  $(\lambda, \theta)_{\text{Pol}}$  legen somit die Richtungsvektoren für G2 fest, es ist

$$\vec{p}_{G2} = a \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta_A \cos \lambda_A \\ \cos \theta_A \sin \lambda_A \\ \sin \theta_A \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{q}_{G2} = a \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta_{\text{Pol}} \cos \lambda_{\text{Pol}} \\ \cos \theta_{\text{Pol}} \sin \lambda_{\text{Pol}} \\ \sin \theta_{\text{Pol}} \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

$a$  ist jeweils der Erdradius. Aus (5.25) und (5.26) kann man jetzt die Normalenvektoren bestimmen und damit auch den Schnittpunkt der beiden Großkreise.

Bisher ist noch nicht näher spezifiziert worden für welche Gitterzellen diese Prozedur notwendig ist. Folgt man Abb. 5.6, kommen besonders diejenigen Zellen des unregelmäßigen Gitters in Frage, deren Seiten eine große Zahl an Längengraden kreuzen. Dies trifft in der Regel auf alle Zellen zu die mit dem Pol einen Punkt gemeinsam haben, da der Abstand der Meridiane dort besonders gering ist.



**Abb. 5.8** Konturlinien der Kosinus-Glockenfunktion vor (unten im Bild) und nach (oben im Bild) Überquerung des Nordpols im Experiment mit der verbesserten Berechnung für polnahe Breitenkreise. Wiederum beträgt der Abstand 100 und die niedrigste eingezeichnete Linie liegt bei 100.

Es hat sich gezeigt, daß die Berechnung der Schnittpunkte zu spürbaren Verbesserungen führt, wenn die Ecke einer Zelle im Bereich  $|\theta| > 80^\circ$  liegt, bei einer T42-Auflösung bedeutet dies, daß etwa 3-4 Breitenkreise rund um die Pole betroffen sind.

Wiederholt man nun das Experiment aus Kapitel 5.2 mit dem verbesserten SLZI-Verfahren, erhält man das Bild aus Abb. 5.8. Die äussere Gestalt der Glockenfunktion ist nun nach der Überquerung des Nordpol deutlich zu erkennen, denn die Konturlinien zeigen annähernd Kreisform. Der Transport des Signals ist ohne Verzerrung und vollständig vollzogen und die in Abb. 5.4 noch beobachtete Spaltung des Signals ist verschwunden. Allerdings wurde auch hier nur auf den qualitativen Aspekt des Transportes geschaut ohne exakte Fehlerberechnungen anzustellen, dies wird im folgenden Abschnitt nachgeholt.

#### 5.4 Quantitative Untersuchungen zum SLZI-Transport auf der Kugel

Hier werden für verschiedene Experimente zunächst Konturlinien-Plots in orthographischer Projektion untersucht. Das Zentrum der Projektion liegt genau in der Mitte der analytischen Lösung. Die Bilder zeigen die analytische Lösung mit gestrichelten Linien und die numerische Lösung mit durchgezogenen Linien jeweils nach einer vollen Rotation um die Kugel. Das Linienintervall beträgt 100 Einheiten und die niedrigste Linie beginnt bei 100. Als zweites Bild wird für jedes Experiment noch ein Differenzenplot zwischen analytischer und numerischer Lösung gezeigt, negative Werte sind gestrichelt und positive Werte durchgezogen dargestellt. Eine Ausnahme bildet Abb. 5.9, dort ist es leider genau umgekehrt. Das Minimum bzw. Maximum der Konturlinien ist jeweils angegeben. Anschließend wird der zeitliche Verlauf einiger globaler Fehlermaße dargestellt. Dazu definiert man zunächst das Integral  $I(\phi)$

$$I(\phi) = \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \phi(\lambda, \theta) \cos\theta d\theta d\lambda, \quad (5.27)$$

welches konsistent mit der gewählten numerischen Methode sein muß. Ist die Methode z.B. kubische Interpolation, dann wird aus (5.27)

$$I(\phi) = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \phi_{ij} \cos\theta_j \Delta\lambda (\Delta\theta)_j. \quad (5.28)$$

$\phi_{ij}$  ist der Gitterpunktwert von  $\phi$  an der Stelle  $(\lambda_i, \theta_j)$ .  $I$  ist die Anzahl der Längengrade und  $J$  die Anzahl der Gaußschen Breiten.  $\Delta\lambda$  ist einfach der äquidistante Abstand zwischen zwei Längengraden. Im Falle von  $(\Delta\theta)_j$  muß man beachten, daß aufgrund des nicht äquidistanten Abstandes keine Werte für halbzahlige Indizes zur Verfügung stehen, daher ist

$$(\Delta\theta)_j = \theta_{j+1/2} - \theta_{j-1/2} = \frac{1}{2}(\theta_{j+1} + \theta_j) - \frac{1}{2}(\theta_j + \theta_{j-1}) = \frac{1}{2}(\theta_{j+1} - \theta_{j-1}). \quad (5.29)$$

Im Falle des SLZI-Verfahrens jedoch sind die  $\phi_{ij}$  schon automatisch Mittelwerte über eine Gitterzelle (i j), die nur noch aufsummiert werden müssen. Denn analog zu (4.5), ist im  $(\lambda-\mu)$ -System

$$\phi_{ij}\Delta A_j = \phi_{ij}\Delta\lambda(\Delta\mu)_j = \int_{\delta A_{ij}} \int \phi(\lambda_j, \mu_j, t - \Delta t) d\lambda d\mu \quad (5.30)$$

die Masse in der Gitterzelle (i j). Die Summe über alle Zellen stellt somit die Gesamtmasse dar. Für  $(\Delta\mu)_j$  gilt das gleiche was in (5.29) für  $(\Delta\theta)_j$  hergeleitet wurde.

Mit Hilfe dieses Integrals können weitere Größen abgeleitet werden, wie z.B die  $l_1$ -,  $l_2$ - und  $l_\infty$ -Norm, gemäß den Definitionen

$$l_1(\phi) = \frac{I[|\phi(\lambda, \theta) - \phi_A(\lambda, \theta)|]}{I[|\phi_A(\lambda, \theta)|]}, \quad (5.31)$$

$$l_2(\phi) = \frac{\{I[(\phi(\lambda, \theta) - \phi_A(\lambda, \theta))^2]\}^{1/2}}{\{I[\phi_A(\lambda, \theta)^2]\}^{1/2}} \quad (5.32)$$

und

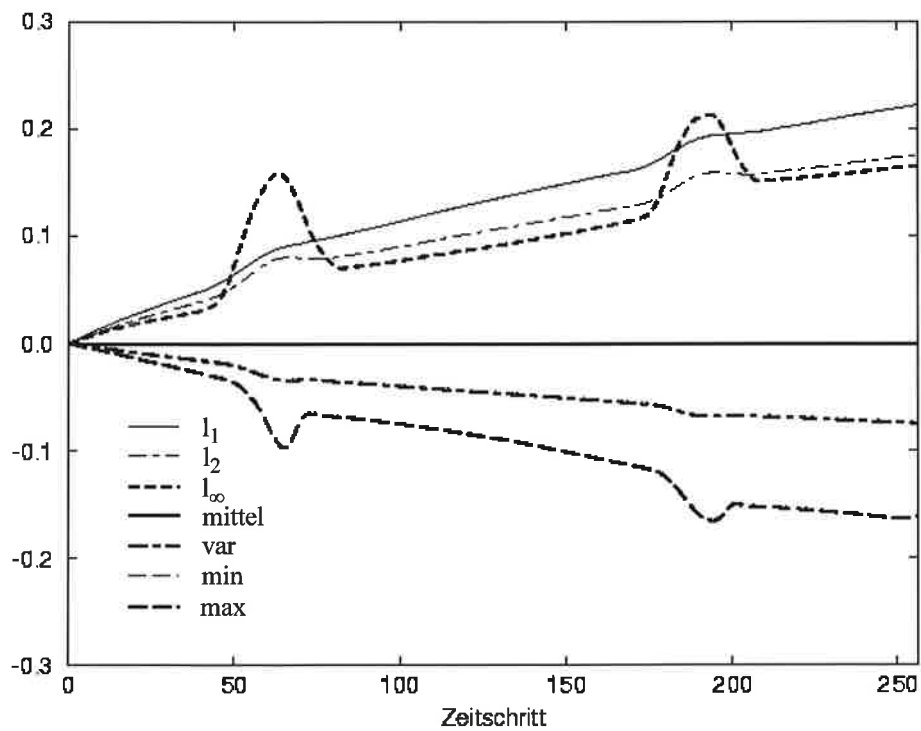
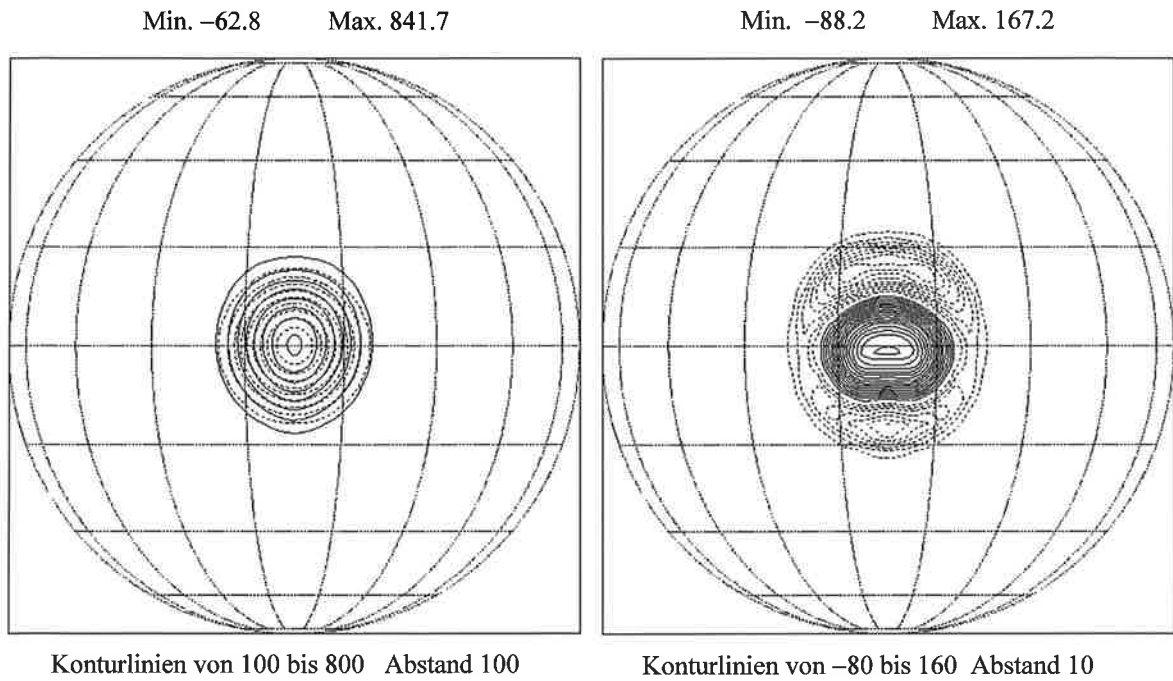
$$l_\infty(\phi) = \frac{\max_{\text{alle } (\lambda, \theta)} |\phi(\lambda, \theta) - \phi_A(\lambda, \theta)|}{\max_{\text{alle } (\lambda, \theta)} |\phi_A(\lambda, \theta)|}. \quad (5.33)$$

$\phi_A$  ist die analytische und  $\phi$  die numerische Lösung. Zusätzlich werden die normierten Größen von Mittelwert, Varianz, Minimum und Maximum aufgezeichnet. Mit  $\bar{\phi} = I[\phi(\lambda, \theta)]$  lauten die entsprechenden Beziehungen:

$$M = \frac{(\bar{\phi} - \bar{\phi}_A)}{\bar{\phi}_0}, \quad (5.34)$$

$$V = \{I[(\phi - \bar{\phi})^2] - I[(\phi_A - \bar{\phi}_A)^2]\} / (I[(\phi_0 - \bar{\phi}_0)^2]), \quad (5.35)$$

$$\phi_{\max} = (\max_{\text{alle } (\lambda, \theta)} \phi(\lambda, \theta) - \max_{\text{alle } (\lambda, \theta)} \phi_A(\lambda, \theta)) / (\Delta\phi) \quad (5.36)$$



**Abb. 5.9** Advektion mit SLZI-Verfahren über Nordpol in T42 Auflösung, Ergebnisse nach einer Umrundung

$$\text{und} \quad \phi_{\min} = (\min_{\text{alle } (\lambda, \theta)} \phi(\lambda, \theta) - \min_{\text{alle } (\lambda, \theta)} \phi_A(\lambda, \theta)) / (\Delta\phi). \quad (5.37)$$

$\Delta\phi$  ist die Differenz zwischen dem Maximum und dem Minimum der analytischen Lösung und  $\phi_0$  ist die analytische Lösung zum Zeitpunkt  $t=0$ . Der zeitliche Verlauf dieser Fehler ist im dritten Bild der jeweiligen Experimente zu sehen. Für die verschiedenen Kurven wurden unterschiedliche Linientypen und -stärken gewählt. Die Legende in den Bildern zeigt die genaue Zuordnung.

In Abb. 5.9 sind nun die Konturlinien und der zeitliche Verlauf der Fehlermaße für das Experiment aus Kapitel 5.3 zu sehen. Das normierte Minimum und die Varianz im unteren Bild sind nicht zu unterscheiden. Schaut man zunächst einmal auf die Konturplots in der oberen Hälfte der Abbildung sieht man ein in allen Richtungen, insbesondere in der Advektionsrichtung, verbreitertes Signal. Diese Ausdehnung geht zu Lasten einer Abflachung im Zentrum der Funktion. Die Differenz zwischen analytischer Lösung und numerischer Lösung im rechten Bild verdeutlicht dies noch einmal. Das Maximum der Differenz scheint bei genauerem Hinsehen nicht exakt auf dem Äquator liegen, d.h. auch ein kleiner Phasenfehler ist zu beobachten. Die mögliche Ursache ist im zeitlichen Verlauf der globalen Fehler angedeutet. Alle Fehler steigen dem Betrage nach im Laufe der Zeit an. Der Anstieg ist zu Beginn der Integration recht groß und bleibt dann annähernd konstant. Besonders markant sind die Zeitpunkte an denen das Signal den Nord- bzw. Südpol überquert, dies ist nach 64 bzw. 192 Zeitschritten der Fall. Die Fehlerverläufe von  $l_{\infty}$ - und Maximumfehler steigen dort rapide an und fallen einige Zeitschritte später ebenso steil wieder ab, allerdings nicht ganz auf das Ausgangsniveau zurück. Offensichtlich zeigt das Maximum der numerischen Lösung bzw. die maximale Differenz zwischen analytischer und numerischer Lösung in allernächster Umgebung der Pole einen großen Fehler. Dies ist bei der qualitativen Betrachtung der Polüberquerung, wie das in Abb. 5.8 geschehen ist, nicht auffällig geworden, zeigt sich aber nunmehr bei der detaillierten Fehleranalyse. Dazu muß in Erinnerung gerufen werden, daß in den bisherigen Experimenten auf der Kugel den zu integrierenden Funktionen bisher keinerlei Einschränkungen wie Monotonie oder Positivität auferlegt wurde. Das bedeutet aber auch, daß ein Überschießen bzw. Unterlaufen der numerischen gegenüber der analytischen Lösung möglich ist. Die Situation am Pol, wo Parabeln über sehr kleine Distanzen integriert werden scheint dafür besonders anfällig. Bedenkt man zudem noch, daß mit der Einführung der Schnittpunkte das ohnehin schon kleine Integrationsgebiet noch weiter unterteilt wurde, stellt sich die Situation verschärft dar. Die qualitative Verbesserung des Ergebnisses ist noch nicht ausreichend um auch eine quantitativ zufriedenstellende Lösung zu erzielen. Um dies zu erreichen wurde ein Polfilter eingeführt, was in reinen Gitterpunktmodellen sehr häufig gemacht wird.



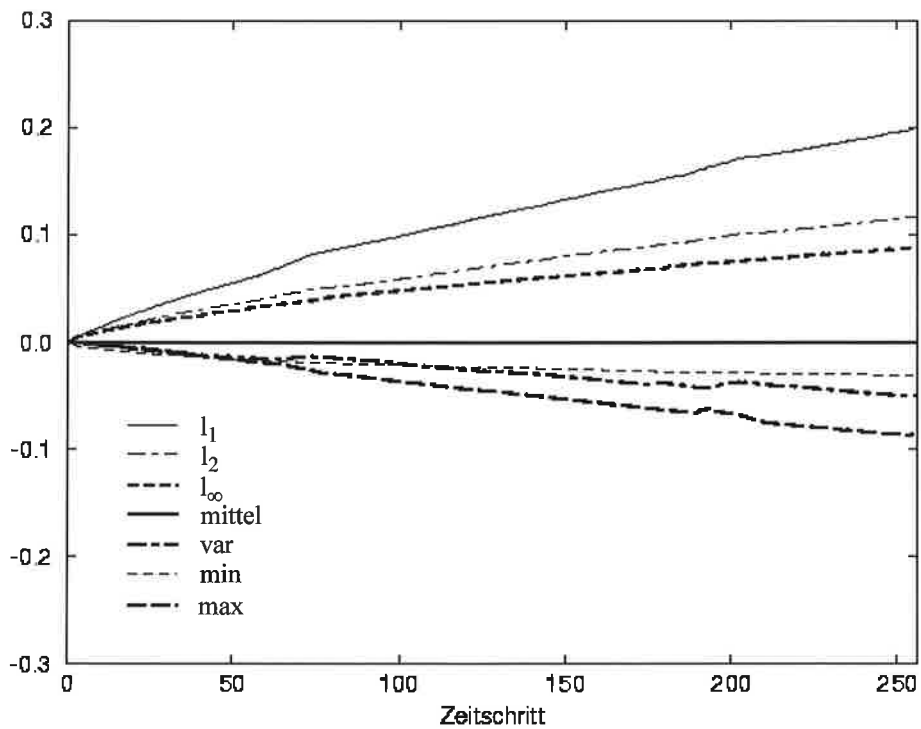
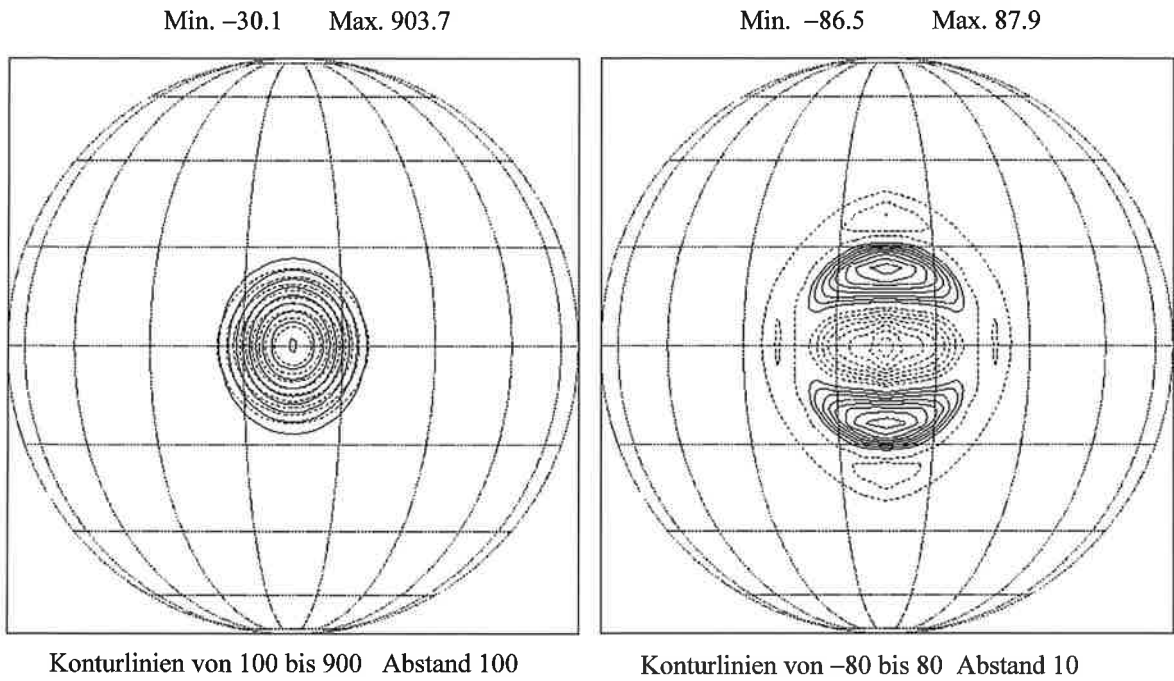


Abb. 5.10 Advektion mit SLZI-Verfahren über Nordpol in T42 Auflösung, Ergebnisse nach einer Umrundung mit Polfilter

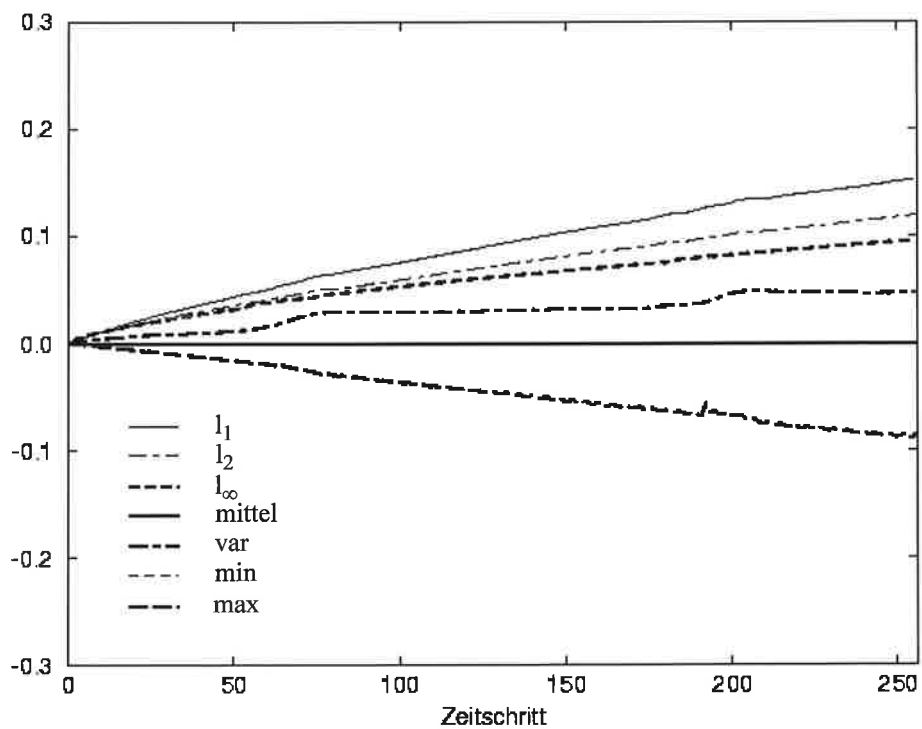
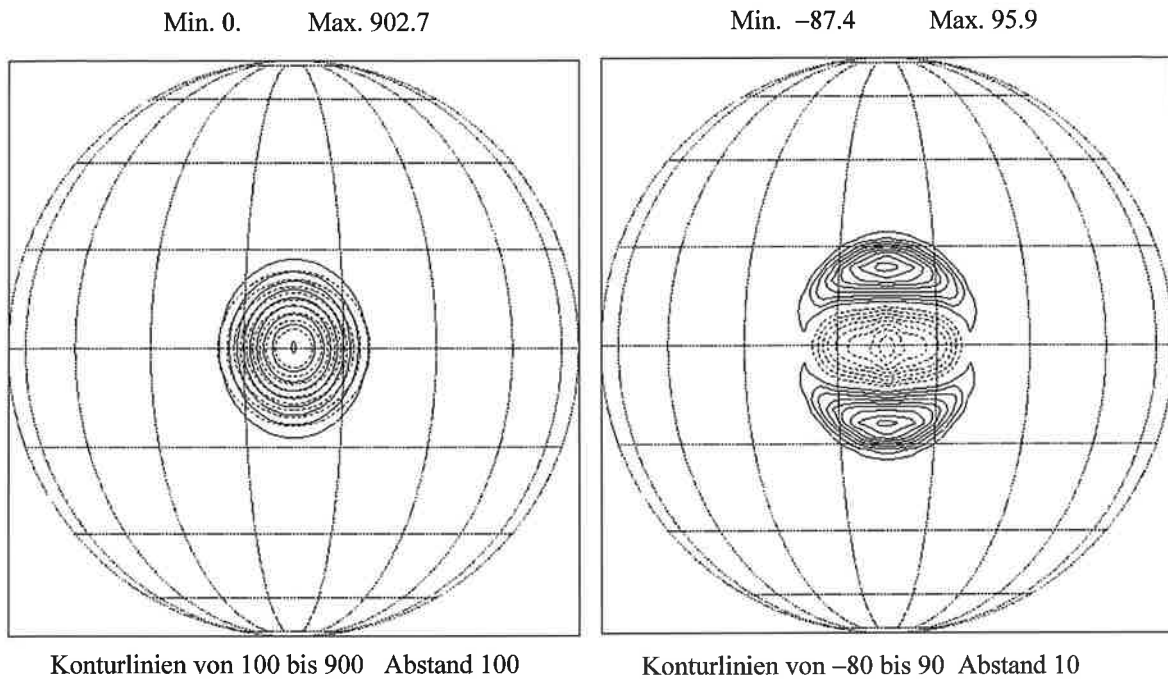


Abb. 5.11 SLZI, Advektion über Nordpol, quadratische Funktionen, mit Polfilter, T42, positiv definit

In dieser Arbeit handelt es sich dabei um ein laufendes Mittel in zonaler Richtung, welches für eine Variable A folgendermaßen definiert ist:

$$\bar{A}_i = \frac{1}{N} \sum_{j=i-M}^{i+M} A_j \quad (5.38)$$

$i$  ist der Gitterindex in zonaler Richtung und  $M = (N - 1)/2$ . Die Idee dabei ist eine Art Mittelung des Signals über  $N$  Gitterzellen zu erreichen, so daß die unterschiedliche Fläche der Zellen des regelmäßigen Gitters etwas ausgeglichen wird. Bei der Wahl von  $N$  wurden Kriterien zugrunde gelegt, die im wesentlichen einer Plausibilitätsbetrachtung genügen. Der Polfilter soll maximal ein Viertel der Breitenkreise pro Hemisphäre beeinflussen und der Übergang zu den unbeeinflussten Breitenkreisen soll einigermaßen fließend sein. Für ein Modell in T42-Auflösung sind dann die ersten acht Breitenkreise von Nord- bzw. Südpol an betroffen. In Tabelle 5.1 sind die im Experiment verwendeten Werte für  $N$  aufgeführt.

|              |   |   |   |   |   |   |   |   |
|--------------|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Breitenkreis | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| N            | 9 | 9 | 7 | 7 | 5 | 5 | 3 | 3 |

Tab. 5.1 Anzahl der Gitterzellen  $N$  pro Breitenkreis, über die durch den Polfilter ein Art Mittel gebildet wird.

Wiederholt man das vorherige Experiment nun mit dem Polfilter ergibt sich als Resultat Abb. 5.10. Um die verschiedenen Einflüsse getrennt voneinander zu untersuchen, ist im Experiment von Abb. 5.11 als zusätzliche Eigenschaft Positivität gefordert, was für diesen Spezialfall vernünftig ist, da die Funktion zu Beginn der Integration ausschließlich positive Werte annimmt. In Tabelle 5.2 sind die Fehler am Ende der Integration für die drei Experimente aufgelistet.

|                                   | $l_1$ | $l_2$ | $l_\infty$          | M | V                    | Min                  | Max                  |
|-----------------------------------|-------|-------|---------------------|---|----------------------|----------------------|----------------------|
| T42, ohne Filter, nicht pos. def. | 0.227 | 0.741 | 0.166               | 0 | -0.761               | -0.767               | -0.163               |
| T42, mit Filter, nicht pos. def.  | 0.198 | 0.117 | $8.9 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $-5.1 \cdot 10^{-2}$ | $-3.1 \cdot 10^{-2}$ | $-8.4 \cdot 10^{-2}$ |
| T42, mit Filter, positiv definit  | 0.153 | 0.119 | $9.7 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $4.7 \cdot 10^{-2}$  | 0                    | $-8.5 \cdot 10^{-2}$ |

Tab. 5.2 Fehler nach 256 Zeitschritten für die drei Experimente mit der SLZI-Methode. In der ersten Zeile wurde weder ein Polfilter verwendet noch Positivität gefordert. In der zweiten Zeile kam ein Polfilter hinzu und in der dritten Zeile ist die Lösung zusätzlich positiv definit.

Durch die Einführung des Polfilters konnte das Ergebnis erheblich verbessert werden. Man kann im zeitlichen Verlauf der Fehler zwar immer noch erkennen zu welchen Zeitpunkten Nord- bzw. Südpol überquert wurden, der sprunghafte Anstieg und Abfall ist jedoch verschwunden. Am Ende der Integration liegen alle Fehler niedriger als in dem Experiment ohne Polfilter obwohl der kontinuierliche Anstieg der Fehler mit der Zeit geblieben ist. Der Differenzenplot zeigt weiterhin ein recht symmetrisches Bild, das heißt der mögliche Phasenfehler ist durch den Polfilter auch beseitigt worden. Die Verbreiterung des Signals findet nunmehr fast ausschließlich in Transportrichtung statt, senkrecht dazu ist sie vernachlässigbar. Die negativen Werte sind im Konturplot nicht zu sehen, da der Abstand der Konturlinien 100 beträgt. Das negative Minimum in Abb. 5.10 entspricht aber immerhin ca. 3% des Maximums, ist also nicht zu vernachlässigen.

Verlangt man von der Lösung zusätzlich Positivität ergeben sich noch geringe Änderungen wie in Abb. 5.11 und Tab. 5.2 zu sehen ist. Der  $l_1$ - Fehler ist sichtbar zurückgegangen, weil der Beitrag der negativen Werte nun ausbleibt. Dieser kompensatorische Effekt fällt bei den anderen Fehlern weg, so daß man beim  $l_2$ - und  $l_\infty$ -Fehler, sowie dem normierten globalen Maximum sogar eine leichte Verschlechterung gegenüber dem Experiment zuvor festzustellen ist. Auch das Maximum der Funktion am Ende der Integration ist leicht gesunken. Dies steht aber im Einklang mit der Erkenntnis das eine positiv definite oder gar monotone numerische Lösung gegenüber einer uneingeschränkten Lösung leicht dissipativ ist. Für alle weiteren Experimente wird jedoch der Transport einer Kosinus-Glockenfunktion direkt über den Pol, in T42-Auflösung, mit quadratischen Funktionen, Polfilter und positiv definierter Lösung als Referenz herangezogen. In den folgenden Experimenten werden einzelne Parameter verändert und ihr Einfluß auf die Lösung diskutiert. Die Abbildungen zu allen weiteren Experimenten finden sich im Anhang D.

## **Experimente mit unterschiedlichen Auflösungen**

Zunächst einmal wird der Einfluß des Gitters auf die numerische Lösung untersucht. Dazu wurden Experimente mit unterschiedlichen Auflösungen analog dem Referenzexperiment (dritte Zeile in Tab. 5.2) durchgeführt. Neben dem Referenzexperiment in T42-Auflösung, wurde noch ein T21, T30 und T63 Lauf durchgeführt. Wie in Tab. 5.3 zu sehen ist nehmen sämtliche Fehler mit steigender Auflösung ab, d.h. die bessere Auflösung führt, wie auch zu erwarten ist, zu einer genaueren numerischen Lösung und die Differenz zwischen beiden Lösungen wird kleiner. Schaut man sich den  $l_1$ - oder  $l_2$ -Fehler an stellt man fest, daß sich der Fehler bei jeder Steigerung der Auflösung in etwa halbiert. Dies gilt aber nicht für den Sprung von T42 auf T63, hier fällt die Verbesserung deutlicher aus. Ein Blick auf die Konturlinien im T63 Experiment zeigt ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung zwischen ana-

lytischer und numerischer Lösung. Für diese Tatsache gibt es aber keinen offensichtlichen Grund, es scheint vielmehr so, daß bei dem gewählten Zeitschritt, der ja in allen Experimenten gleich ist, die Startpunkte der Trajektorien im T63-Gitter zufällig besonders günstig liegen. Das ist dann der Fall, wenn die Überlappung einer Zelle des unregelmäßigen Gitters mit einer einzigen Zelle des regelmäßigen Gitters besonders groß ist.

|               | $l_1$               | $l_2$               | $l_\infty$          | M | V                   | Min | Max                  |
|---------------|---------------------|---------------------|---------------------|---|---------------------|-----|----------------------|
| Auflösung T21 | 0.734               | 0.465               | 0.367               | 0 | 0.322               | 0   | -0.359               |
| Auflösung T30 | 0.351               | 0.258               | 0.205               | 0 | 0.109               | 0   | -0.205               |
| Auflösung T42 | 0.153               | 0.119               | $9.7 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $4.7 \cdot 10^{-2}$ | 0   | $-8.5 \cdot 10^{-2}$ |
| Auflösung T63 | $2.1 \cdot 10^{-2}$ | $1.8 \cdot 10^{-2}$ | $1.4 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $1.5 \cdot 10^{-2}$ | 0   | $-2.2 \cdot 10^{-3}$ |

**Tab. 5.3** Fehler nach 256 Zeitschritten für die Experimente mit unterschiedlicher Auflösung. Das T42-Experiment ist das Referenzexperiment.

Ein Blick auf die Differenzenplots zeigt eine weitere Besonderheit beim T63-Experiment. Während bei allen anderen Auflösungen im wesentlichen im Zentrum der Kosinus-Glockenfunktion eine Abflachung und an den Rändern in Advektionsrichtung ein Zerfließen des Signals zu beobachten ist, sind die Verhältnisse im T63-Experiment leicht verändert. Hier machen sich auch dissipative Effekte senkrecht zur Transportrichtung bemerkbar. Sie sind von der Amplitude her gesehen zwar absolut klein, aber doch größer als entsprechende Effekte in Transportrichtung. Noch bedeutender erscheint mir aber eine zweite Beobachtung. Der Differenzenplot im T63-Experiment deutet auf eine Tendenz zur Aufspaltung des Signals und zur Herausbildung zweier Maxima hin. Für das SLZI-Verfahren ist möglicherweise eine Grenze erreicht an der die feine Auflösung am Pol zu Problemen führen kann. Es ist ohnehin empfehlenswert bei derartigen Auflösungen mit einem sogenannten reduzierten Gitter zu arbeiten. Bei einem solchen Gitter ist die Anzahl der Längengrade in einigen Breitenkreisen in Polnähe gegenüber der Anzahl am Äquator verringert. Im Ausblick werde ich auf diesen Punkt aber noch näher eingehen.

### Experimente mit unterschiedlichen Funktionen

Der experimentelle Vergleich von konstanten, linearen und quadratischen Funktionen bestätigt im die in den vorherigen Kapiteln beobachteten Eigenschaften. Die exakten Zahlen nach 256 Zeitschritten sind Tab. 5.4 zu entnehmen. Dort ist zusätzlich noch ein Experiment mit einer traditionellen bikubischen Interpolation sowie wie einer positiv definiten Variante davon aufgeführt. Das Experiment mit konstanten Funktionen fällt auch hier

erwartungsgemäß mit relativ großen Fehlern auf, die Gründe dafür sind bekannt und in Kapitel 3 und 4 schon ausreichend erläutert worden. Interessant ist allerdings die Beobachtung, daß in den Fehlerkurven des Experiments mit konstanten Funktionen die Überquerung der Pole nicht zu sehen ist, während sie in allen anderen Experimenten ja durch einen mehr oder minder großen Ausschlag erkennbar ist. Die Variation der Kosinus-Glockenfunktion innerhalb der Zellen scheint in der Nähe des Pols durch eine konstante Funktion ausreichend beschrieben zu sein. Dieses Ergebnis kommt sogar zustande ohne einen Polfilter zu benutzen.

|                               | $l_1$ | $l_2$ | $l_\infty$          | M                    | V                    | Min                  | Max                  |
|-------------------------------|-------|-------|---------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| T42, quadratische Fkt.        | 0.153 | 0.119 | $9.7 \cdot 10^{-2}$ | 0                    | $4.7 \cdot 10^{-2}$  | 0                    | $-8.5 \cdot 10^{-2}$ |
| T42, lineare Fkt.             | 0.204 | 0.158 | 0.124               | 0                    | $5.5 \cdot 10^{-2}$  | 0                    | -0.124               |
| T42, konstante Fkt.           | 1.263 | 0.759 | 0.762               | 0                    | -0.285               | 0                    | -0.761               |
| T42, bikubische Interpolation | 0.254 | 0.152 | 0.119               | $-2.5 \cdot 10^{-2}$ | $-6.5 \cdot 10^{-2}$ | $-3.4 \cdot 10^{-2}$ | -0.118               |
| T42, pos. def. bikub. Interp. | 0.202 | 0.156 | 0.123               | $6.4 \cdot 10^{-2}$  | $5.4 \cdot 10^{-2}$  | 0                    | -0.121               |

**Tab. 5.4** Fehler nach 256 Zeitschritten für die Experimente mit verschiedenen Funktionen. Zusätzlich sind als Vergleich Experimente mit bikubischer Interpolation durchgeführt worden. Das T42-Experiment mit quadratischen Funktionen ist das Referenzexperiment.

Stellt man einen Vergleich zwischen den Experimenten mittels des SLZI-Verfahrens und bikubischer Interpolation an, bestätigt sich das Bild aus Kapitel 3 und 4. Die Integration linearer Funktionen liefert für dieses Experiment in etwa ähnliche Eigenschaften wie semi-Lagrangische Interpolation. Konstante Funktionen schneiden erwartungsgemäß deutlich schlechter ab, während quadratische Funktionen ein etwas besseres Resultat ergeben. Nebenbei sei erwähnt, daß die Erhaltungseigenschaft natürlich unabhängig von der Wahl der Funktionen ist und uneingeschränkt erfüllt wird. Wie zuvor schon beim SLZI-Verfahren festgestellt wurde, zeigt auch das Interpolationsverfahren bei der Einschränkung auf eine positiv definite Lösung einen leichten Anstieg aller Fehler bis auf den  $l_1$ -Fehler. Dies ist also keine Besonderheit des neuen Verfahrens.

Bisher ist ein wichtiger Aspekt numerischer Verfahren noch nicht diskutiert worden, nämlich die Effizienz der Methode, welche ihren Ausdruck in der erforderlichen Rechenzeit für ein Experiment unter genau definierten Bedingungen findet. Da das SLZI-Verfahren einfach als eine weitere Option in das IFS-Modell integriert wurde, sind die Bedingungen gegenüber der quasi-monotonen bikubischen Interpolation genau gleich. Die Experimente

wurden auf einer Workstation durchgeführt und waren daher unabhängig von momentanen Auslastungen, wie das auf einem Großrechner der Fall sein kann. Verglichen wird die Laufzeit des Experiments mit semi-Lagrangischer Interpolation und des SLZI-Verfahren mit quadratischen, linearen und konstanten Funktionen. Bei allen Experimenten wurde eine positiv definite Lösung verlangt. Die Zeitangaben in Tab. 5.5 sind mit der Laufzeit des klassischen Verfahrens normiert.

|                    | Interpolation | quadratisch | linear | konstant |
|--------------------|---------------|-------------|--------|----------|
| normierte Laufzeit | 1             | 1.65        | 1.17   | 0.92     |

**Tab. 5.5** normierte Laufzeiten verschiedener Experimente im Vergleich

Mit dem Vergleich wird deutlich, daß die exakte Erhaltung der Masse ihren Preis hat. Allerdings muß man bedenken, daß die erhöhte Rechenzeit für diesen Transport in einem vollständigen Atmosphärenmodell nicht sehr in Gewicht fällt. Strahlungsprozesse, Wolken- und Turbulenzparametrisierung benötigen deutlich mehr Rechenzeit als adiabatische Prozesse insgesamt. Bezieht man sich auf die linearen Funktionen so ist der Mehraufwand sogar recht gering und das mit dem Vorteil der exakten Massenerhaltung. Die konstanten Funktionen sind zwar noch etwas günstiger, sie stehen aber aus anderen Gründen nicht zur Diskussion. Der deutliche Mehraufwand bei den quadratischen Funktionen entsteht vor allem aus zwei Gründen: Zum einen ist die Berechnung und Integration dieser Funktionen aufwendiger als eine bikubische Interpolation und zum anderen schlägt die zusätzliche Berücksichtigung von Schnittpunkten und die daraus resultierende feinere Unterteilung des Integrationsgebietes am Pol negativ zu Buche. Der letztgenannte Grund bietet aber noch Potential einer Reduzierung der Rechenzeit.

### **Transport mit verschiedenen Orientierungen des Windfeldes**

Neben der Advektion direkt über den Pol sollen zum Schluß auch noch Experimente, die einen Transport entlang des Äquators und, um Symmetrieeffekte auszuschließen, in kleinen Winkeln abweichend von Pol und Äquator zeigen, betrachtet werden. Die Orientierung des Windfeldes kann durch den Winkel  $\alpha$  in Gleichung (5.23) beeinflusst werden. Wie schon zu Beginn des Kapitels erwähnt wurde, bedeutet  $\alpha=\pi/2$  den Transport direkt über die Pole und  $\alpha=0$  entsprechend entlang des Äquators. Die Abweichungen von diesen Extremfällen werden durch  $\alpha=(\pi/2)-0.05$  bzw.  $\alpha=-0.05$  definiert. In Tab. 5.6 sind die Ergebnisse notiert. Die Fehler liegen etwa alle im selben Bereich und keine Orientierung scheint bevorzugt zu sein. Dies ist nicht selbstverständlich, da die Advektion direkt über den Pol eine größere Herausforderung an ein numerisches Verfahren ist als z.B. entlang des Äquators. Betrachtet

man das Experiment bei dem die Rotation in einem kleinen Winkel  $\alpha$  am Pol vorbei läuft, so kann man in den zeitlichen Verläufen der Fehler den Einfluß des Pols kaum mehr erkennen.

|                           | $l_1$ | $l_2$ | $l_\infty$          | M | V                    | Min | Max                  |
|---------------------------|-------|-------|---------------------|---|----------------------|-----|----------------------|
| $\alpha = \pi/2$          | 0.153 | 0.119 | $9.7 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $4.7 \cdot 10^{-2}$  | 0   | $-8.5 \cdot 10^{-2}$ |
| $\alpha = (\pi/2) - 0.05$ | 0.178 | 0.105 | $8.2 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $-4.6 \cdot 10^{-2}$ | 0   | $-7.6 \cdot 10^{-2}$ |
| $\alpha = 0$              | 0.201 | 0.118 | $9.0 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $-5.2 \cdot 10^{-2}$ | 0   | $-8.7 \cdot 10^{-2}$ |
| $\alpha = -0.05$          | 0.192 | 0.113 | $8.7 \cdot 10^{-2}$ | 0 | $-4.9 \cdot 10^{-2}$ | 0   | $-8.2 \cdot 10^{-2}$ |

**Tab. 5.6** Fehler nach 256 Zeitschritten für die Experimente mit verschiedenen Orientierungen des Windfeldes. Das T42-Experiment mit  $\alpha = \pi/2$  ist das Referenzexperiment.

Den Zeitpunkt an dem das Signal seinen kürzesten Abstand zum Pol hat kann man nur noch schwach erkennen. Die Differenzbilder zeigen deutlich, daß die Funktion in der jeweiligen Advektionsrichtung leicht auseinander läuft und in der Mitte etwas flacher wird. Die unterschiedliche Höhe der Dämpfung ist aber eher zufällig und es ist wohl so, daß der gewählte Zeitschritt sich je nach Transportrichtung verschieden günstig auswirkt.

### Vergleich mit Literaturwerten

Zum Abschluß soll nun auch noch ein Vergleich mit einem in der in Literatur zitierten Experiment erwähnt werden. In *Rasch (1994)* wird ein Experiment gezeigt welches exakt die gleichen Parameter wie in dieser Arbeit verwendet. Die Parameter sind in *Rasch (1994)* nicht explizit erwähnt, jedoch wird auf *Williamson und Rasch (1989)* Bezug genommen, wo das Experiment detailliert beschrieben wird.

|                                      | $l_1$ | $l_2$ | $l_\infty$          | V                     | Min                   | Max                  |
|--------------------------------------|-------|-------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|
| Rasch, RG2.8                         | 0.289 | 0.176 | 0.164               | $-7.98 \cdot 10^{-4}$ | $-2.71 \cdot 10^{-2}$ | -0.150               |
| Rasch, RG2.8M                        | 0.181 | 0.158 | 0.196               | $-9.69 \cdot 10^{-4}$ | 0                     | -0.210               |
| T42, quadr. Fkt., nicht pos. definit | 0.198 | 0.117 | $8.9 \cdot 10^{-2}$ | $-5.1 \cdot 10^{-2}$  | $-3.1 \cdot 10^{-2}$  | $-8.4 \cdot 10^{-2}$ |
| T42, quadr. Fkt., pos. definit       | 0.153 | 0.119 | $9.7 \cdot 10^{-2}$ | $4.7 \cdot 10^{-2}$   | 0                     | $-8.5 \cdot 10^{-2}$ |

**Tab. 5.7** Fehler nach 256 Zeitschritten für die Experimente aus *Rasch (1994)* und den entsprechenden Experimenten mit der SLZI-Methode aus dieser Arbeit.



*Rasch (1994)* löst die Transportgleichung in Flußform und approximiert den zweidimensionalen Transportoperator durch eine Sequenz eindimensionaler Operatoren auf ähnliche Art und Weise wie *Lin und Rood (1996)* und *Leonard (1996)*. Die Bezeichnung RG2.8 in seinem Experiment bedeutet, daß er ein reduziertes Gaußsches Gitter in T42 Auflösung verwendet. Der Begriff "reduziert" bedeutet in diesem Zusammenhang, daß die Anzahl der Längengrade in einigen Breitenkreisen gegenüber der Anzahl am Äquator verringert wurde. Wie die Verringerung begründet ist, wird in *Rasch (1994)* ausführlich beschrieben. Das Experiment RG2.8M bezeichnet eine monotone Version. Die Ergebnisse nach 256 Zeitschritten sind in Tab. 5.7 zu sehen. Man erkennt, daß die Fehler der SLZI-Methode prinzipiell in der gleichen Größenordnung liegen wie die Fehler in den Experimenten von Rasch. Die meisten Fehler sind im SLZI-Verfahren sogar etwas geringer. Das gilt jedoch nicht für die Varianz, hier scheint Rasch deutlich besser zu liegen, was aber zunächst einmal nicht zu verstehen ist. Allerdings berechnet Rasch die Varianz auch etwas anders, denn Gleichung (35) in *Rasch (1994)* lautet,

$$V = \{I[(z(\lambda, \phi) - z(\lambda, \phi))^2] / I[(z_T(\lambda, \phi) - z_T(\lambda, \phi))^2]\} - 1 \quad (5.39)$$

worin  $z(\lambda, \phi)$  die skalare Variable ist, die transportiert wird und der Index T die analytische Lösung bezeichnet. Diese Definition ist aber abweichend von (5.35), der in dieser Arbeit verwendeten Definition aus *Williamson et al. (1992)*.

Als kurzes Fazit läßt sich festhalten, daß die Eigenschaften des SLZI-Verfahrens sich mit denen klassischer semi-Lagrangischer Verfahren durchaus messen lassen können. Verwendet man quadratische Funktionen, so ergibt sich sogar ein formal genaueres Verfahren als man es bei der bikubischen Interpolation erhält. Allerdings ist das SLZI-Verfahren etwas aufwendiger, was aber durch die zusätzliche Eigenschaft der Erhaltung der Gesamtmasse gerechtfertigt ist.



## 6. Ergebnisse eines Experiments mit realen Daten

Während im letzten Kapitel mit Hilfe eines Testproblems, dessen analytische Lösung bekannt war, die Überprüfung der Eigenschaften des SLZI-Verfahrens im Vordergrund stand, soll nun gezeigt werden, daß die Methode auch bei Verwendung realer Daten brauchbare Ergebnisse liefert. Da die Strömung in guter Näherung zweidimensional sein soll, ist die Auswahl der Testfälle eingeschränkt. Gut geeignet ist jedoch eine Fallstudie über die Advektion von potentieller Vorticity auf der 450 K Isentropenfläche im Zeitraum vom 16 bis 28 Januar 1992, die bei *Plumb et al. (1992)* dokumentiert ist. In diesem Testfall wird die Strömung als adiabatisch und reibungsfrei angenommen, d.h. die Luftpartikel bewegen sich auf Isentropenflächen und können diese nicht verlassen, und somit bleibt die potentielle Vorticity erhalten. An dieser Stelle sei noch einmal betont, daß die meteorologischen Aspekte der potentiellen Vorticity bei diesem Experiment nicht von Interesse sind. Sie steht vielmehr stellvertretend für ein beliebiges skalares Feld, welches unter den gegebenen Bedingungen einem konservativen Transport unterliegt. Der Schwerpunkt der Auswertung ist demnach auch etwas anders als bei *Plumb et al. (1992)*.

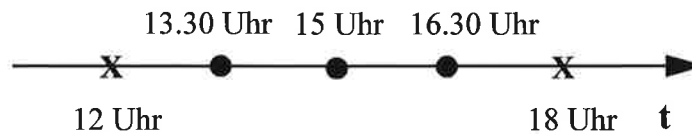
Das Anfangsfeld der potentiellen Vorticity kommt aus Reanalyse-Daten des EZMWF in T42 Auflösung zum Zeitpunkt 16 Januar 1992, 12 UTC. Dieses Feld wird mit den entsprechend balancierten Winden bis zum 28 Januar 12 UTC, also 12 Tage lang, transportiert.

Aus den Reanalyse-Daten (im wesentlichen zonalen und meridionalen Wind sowie Temperatur) müssen die Anfangsfelder auf der 450 K-Isentrope zunächst noch vorbereitet werden. Im einzelnen sind folgende Schritte notwendig:

- berechne die potentielle Temperatur auf Druckflächen
- berechne die Vorticity auf Druckflächen
- berechne potentielle Vorticity (PV) auf Druckflächen
- interpoliere PV, zonalen und meridionalen Wind auf Isentropenfläche

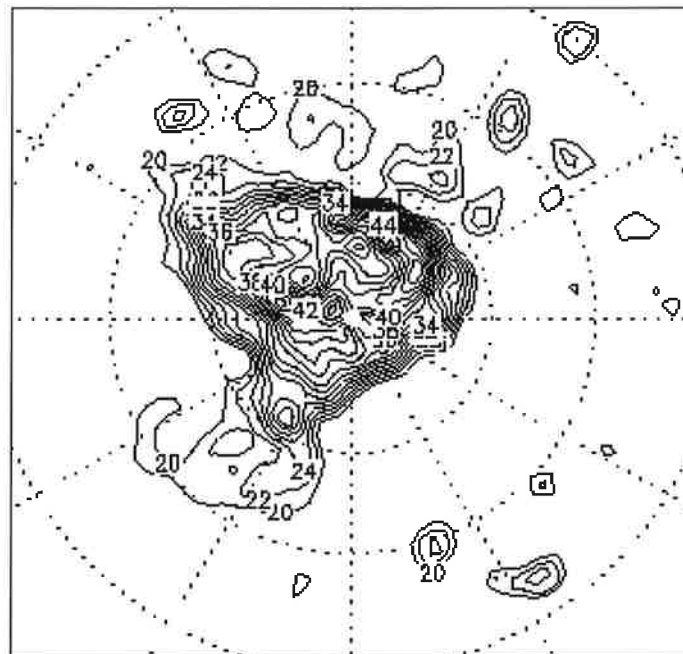
Diese vorbereitenden Berechnungen wurden freundlicherweise von Marco Giorgetta durchgeführt, die genaue Methode mit den einzelnen Gleichungen ist bei *Andrews et al. (1987)* beschrieben. Für die Berechnung der notwendigen Ableitungen nach der geographischen Länge bzw. Breite auf der Kugeloberfläche wurde ein 5-Punkt-Verfahren benutzt. An den Polen muß das entsprechende Feld für die meridionalen Ableitungen erweitert werden. Ableitungen nach der Druckkoordinate werden ebenfalls nach einem 5-Punkt-Schema berechnet. Ausnahmen davon sind das erste bzw. letzte Level, wo ein 2-Punkt-Verfahren benutzt wurde und das zweite bzw. vorletzte Level auf das ein 3-Punkt-Verfahren angewendet wurde.

Das Experiment wird in T42 Auflösung mit einem Zeitschritt von 90 min gerechnet und zwar je einmal mit dem SLZI-Verfahren ohne eine Einschränkung auf Positivität und klassischer semi-Lagrangischer bikubischer Interpolation. Da das Windfeld aus den Reanalyse-daten nur alle 6 Stunden vorliegt, muß zwischen diesen Terminen interpoliert werden. In Abb. 6.1 ist beispielsweise der Zeitraum von 12 Uhr bis 18 Uhr dargestellt.



**Abb. 6.1** Darstellung der Abfolge von Analysewerten (Kreuz) und interpolierten Werten (ausgefüllte Kreise) in einem 6-Stunden-Intervall.

Auf einen Beobachtungswert folgen drei interpolierte Werte. Zwischen linearer und kubischer Interpolation wurde kein Unterschied festgestellt der einen relevanten Einfluß auf das Experiment gehabt hätte. Das Anfangsfeld der potentiellen Vorticity (16.01.1992, 12 UTC) ist in Abb. 6.2 zu sehen.



**Abb. 6.2** Potentielle Vorticity auf der 450-K-Isentrope um 12 UTC am 16 Januar 1992. Weiteres ist im Text nachzulesen.

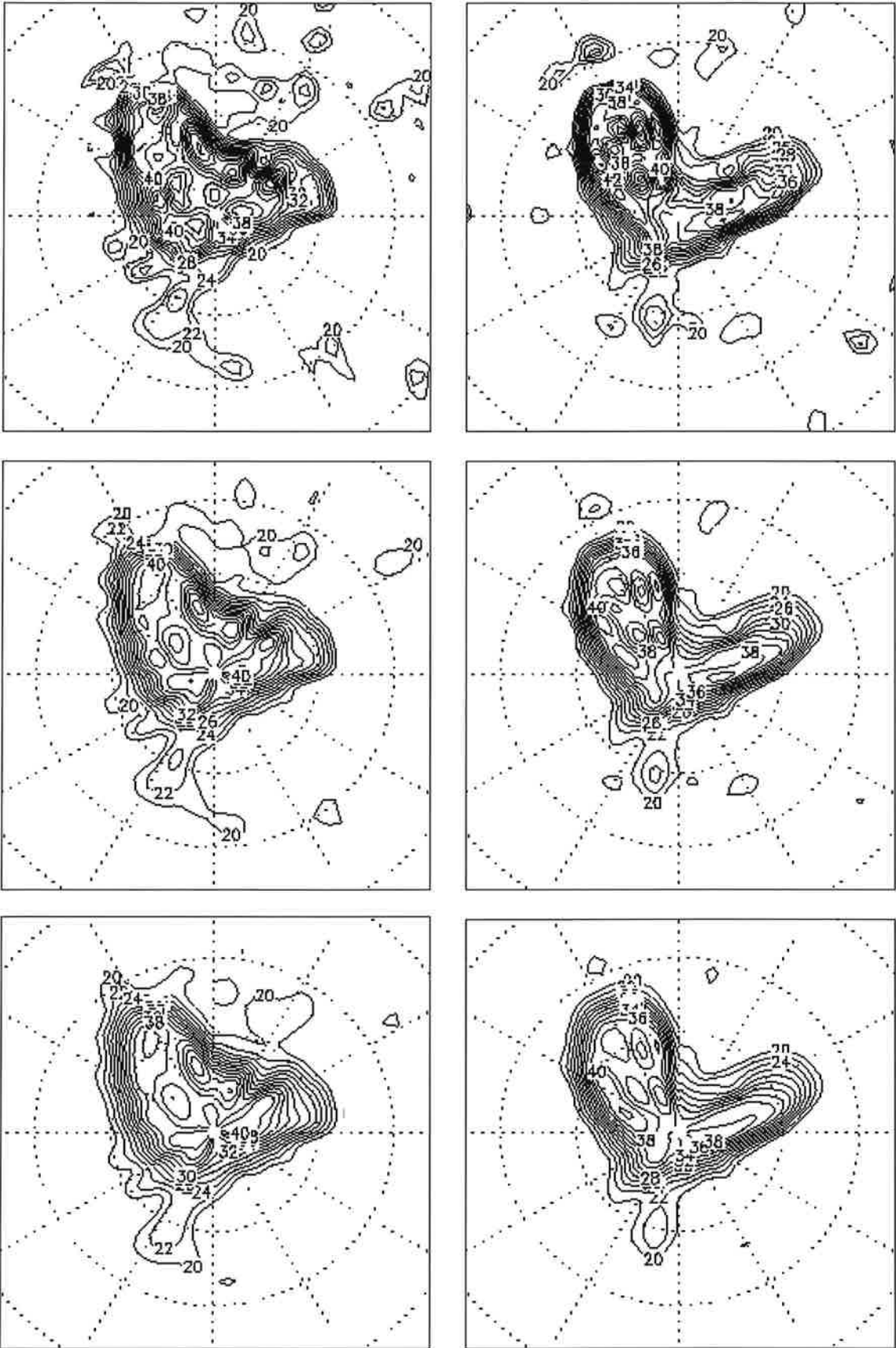


Abb. 6.3 PV vom 18.01. (linke Hälfte) und 20.01.92 (rechte Hälfte), 12 UTC.

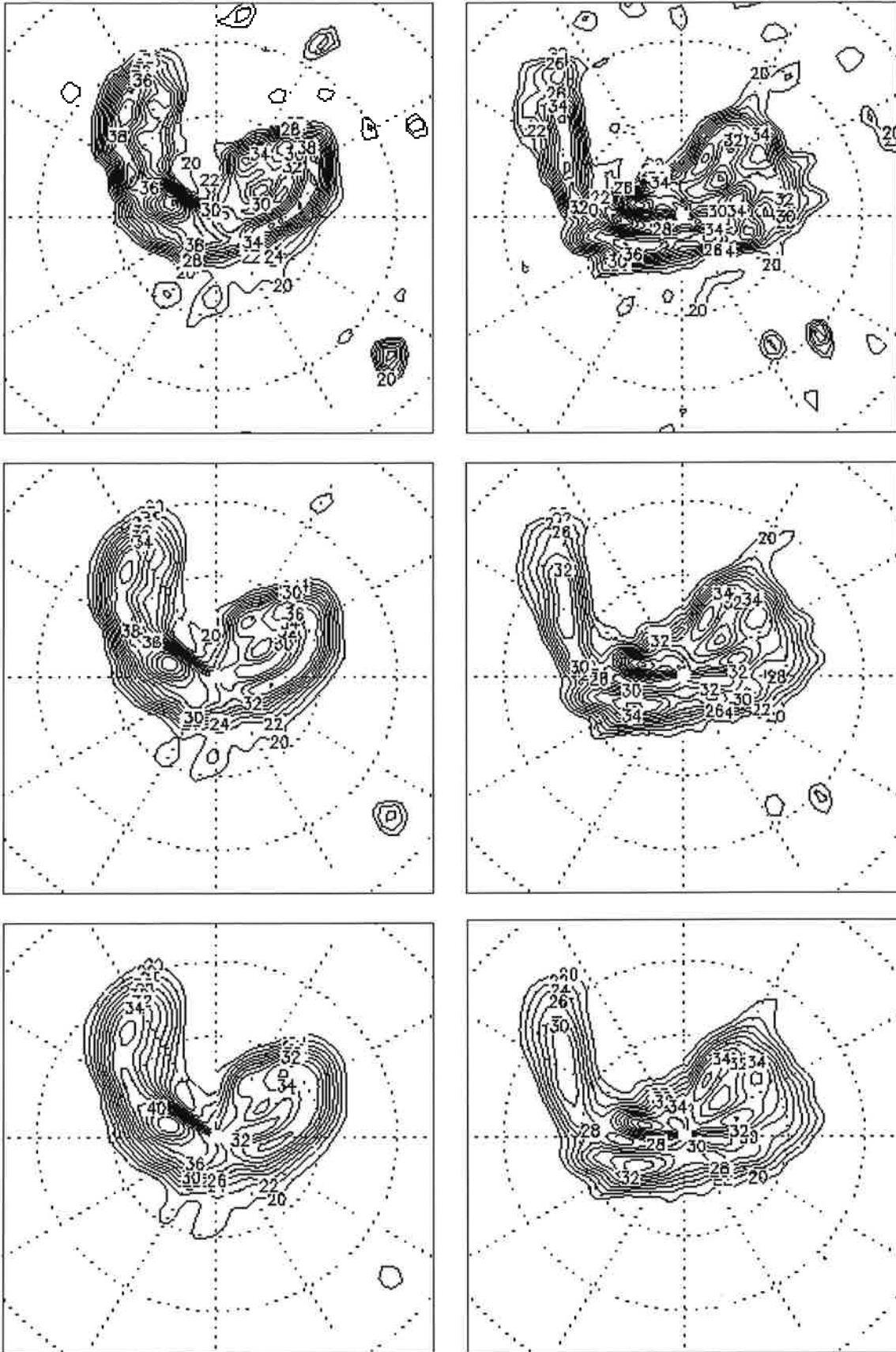


Abb. 6.4 PV vom 22.01. (linke Hälfte) und 24.01.92 (rechte Hälfte), 12 UTC.

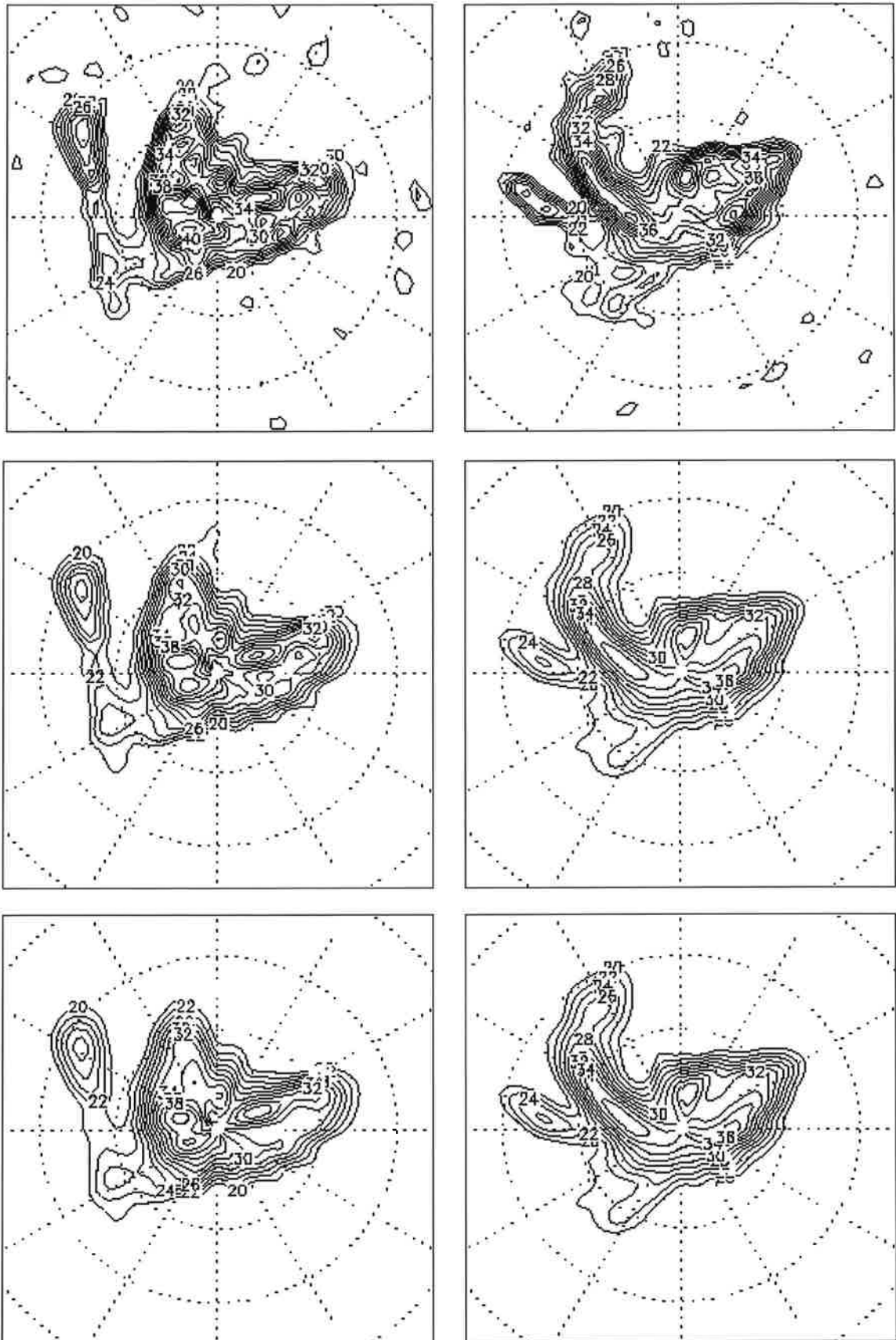


Abb. 6.5 PV vom 26.01. (linke Hälfte) und 28.01.92 (rechte Hälfte), 12 UTC.

In Abb. 6.2 bis Abb. 6.5 sind die Ergebnisse zu sehen. Alle Konturlinien sind in Einheiten von  $10^6 \text{ K s}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$  dargestellt. Die niedrigste Linie beginnt bei 20 und der Konturlinienabstand ist 2 in den vorgenannten Einheiten. Damit das kleinskalige Rauschen in den Abbildungen unterdrückt wird wurde die Konturlinie 20 als niedrigste Linie gewählt.

Das Muster des polaren Wirbels in seiner Entwicklung ist in beiden Experimenten recht gut zu erkennen. Schaut man auf die feineren Strukturen, so sieht man beim SLZI-Experiment etwas mehr die einzelnen Nebenmaxima im Inneren des Musters. Betrachtet man beispielsweise die linke Hälfte von Abb. 6.3, das sind die Bilder vom 18.01. um 12 UTC, dann sieht man im mittleren Bild das Ergebnis des SLZI-Verfahrens. Dort sind am oberen Rand der Struktur deutlich mehr Einzelheiten zu sehen als im unteren Bild, welches das Resultat der bikubischen Interpolation ist. Die längliche Ausstülpung ist im mittleren Bild noch ohne Unterbrechung zu sehen, während sie unten nicht mehr als zusammenhängendes Element zu erkennen ist. Beim Experiment mit kubischer Interpolation sind die Einzelheiten teilweise durch Dissipation frühzeitig im Laufe der Integration verschwunden. Die Dissipation macht sich wie erwartet bei der Interpolation stärker bemerkbar als beim genaueren SLZI-Verfahren. Insofern konnten die zuvorgewonnen Erkenntnisse auch in einem Experiment mit realen Daten bestätigt werden. Kleinere Strukturen außerhalb des zentralen Musters werden in beiden Experimenten nur unzureichend wiedergegeben. Erhöht man die horizontale Auflösung so ist zu erwarten, daß auch kleinere Strukturen besser über den Zeitraum von 12 Tagen transportiert werden.

Die im allgemeinen gute Übereinstimmung zwischen den berechneten Ergebnissen und den Analysedaten auf der 450 K-Isentrope läßt den Schluß zu, daß die Annahme einer adiabatischen und reibungsfreien Strömung während der Integrationsperiode ausreichend gut erfüllt war. Am 28 Januar ist bei beiden Experimenten allerdings kaum mehr ein Unterschied festzustellen. Die kleinskaligen Strukturen in denen sie sich unterscheiden sind stark gedämpft und im Konturlinienplot nicht mehr zu sehen.



## 7. Erweiterungen und Ergänzungen des SLZI-Verfahrens

In diesem Kapitel werden zwei Erweiterungen der SLZI-Methode behandelt. Einmal wird die Möglichkeit das Verfahren auf drei Dimensionen auszudehnen diskutiert, was notwendig ist, da realistische Fragestellungen im allgemeinen von dreidimensionaler Natur sind. Spezialfälle, wie der in Kapitel 6 behandelte, bilden eine Ausnahme. Die zweite Erweiterung zielt darauf ab, das neue Verfahren mit dem semi-impliziten Verfahren zur Lösung von Helmholtzgleichungen zu verbinden. Die zugrunde liegende Idee, *Machenhauer (1994)*, ist die SLZI-Methode nicht nur zur Behandlung des advektiven Transports einzusetzen, sondern auf den kompletten Satz der primitiven Gleichungen auszudehnen. In *Machenhauer und Olk (1997)* sind dazu die Ergebnisse einfacher eindimensionaler Experimente vorgestellt worden.

### 7.1 Das SLZI-Verfahren in drei Dimensionen

Beim bisher betrachteten 2D-Verfahren ging es um eine konservative Abbildung zwischen einem unregelmäßigen und einem regelmäßigen Gitter. Die einzelnen Zellen des unregelmäßigen Gitters sind allgemeine Vierecke. Da die Eckpunkte der Vierecke aber wiederum die Startpunkte der Trajektorien sind, wird deren Gestalt durch das Strömungsfeld bestimmt. In einem dreidimensionalen nicht-hydrostatischen Modell gibt es auch eine Vertikalgeschwindigkeit, so daß man anstatt eines Vierecks nun die entsprechenden dreidimensionalen Körper erhält die ein unregelmäßiges Gitternetz bilden. In einem hydrostatischen Modell fehlt diese Geschwindigkeitskomponente, daher muß der vertikale Transport dort auf andere Weise bewerkstelligt werden. Dazu betrachte man zunächst die diskrete Form der Kontinuitätsgleichung, dessen Herleitung in *Machenhauer (1994)* zu finden ist

$$\Delta p_k^+ \Delta A^+ = \overline{\delta p_k^-} \delta A_k^-, \quad (7.1)$$

hierin ist  $p$  der Druck und  $k$  bezeichnet eine beliebige Schicht in dem vertikalen Koordinatensystem. Dabei wurde angenommen, daß eine 3D-Gitterbox, die zum Zeitpunkt  $t+\Delta t$  in einer regelmäßigen Gitterzelle in der Schicht  $k$  endet, mit vertikalen Seitenflächen durch den Horizontalwind transportiert wurde. Die Druckdifferenz zum neuen Zeitpunkt ist mit dem Bodendruck  $p_s$  durch

$$\Delta p_k^+ = \Delta A_k + \Delta B_k p_s^+ \quad (7.2)$$

verbunden.  $A_k$  und  $B_k$  sind Konstanten, die die vertikalen Schichten im Modell festlegen. Das Ergebnis dieser Betrachtung ist ein implizites System gekoppelter linearer Gleichungen im Bodendruck, jeweils eine Gleichung pro horizontaler Zelle. Dieses Verfahren würde

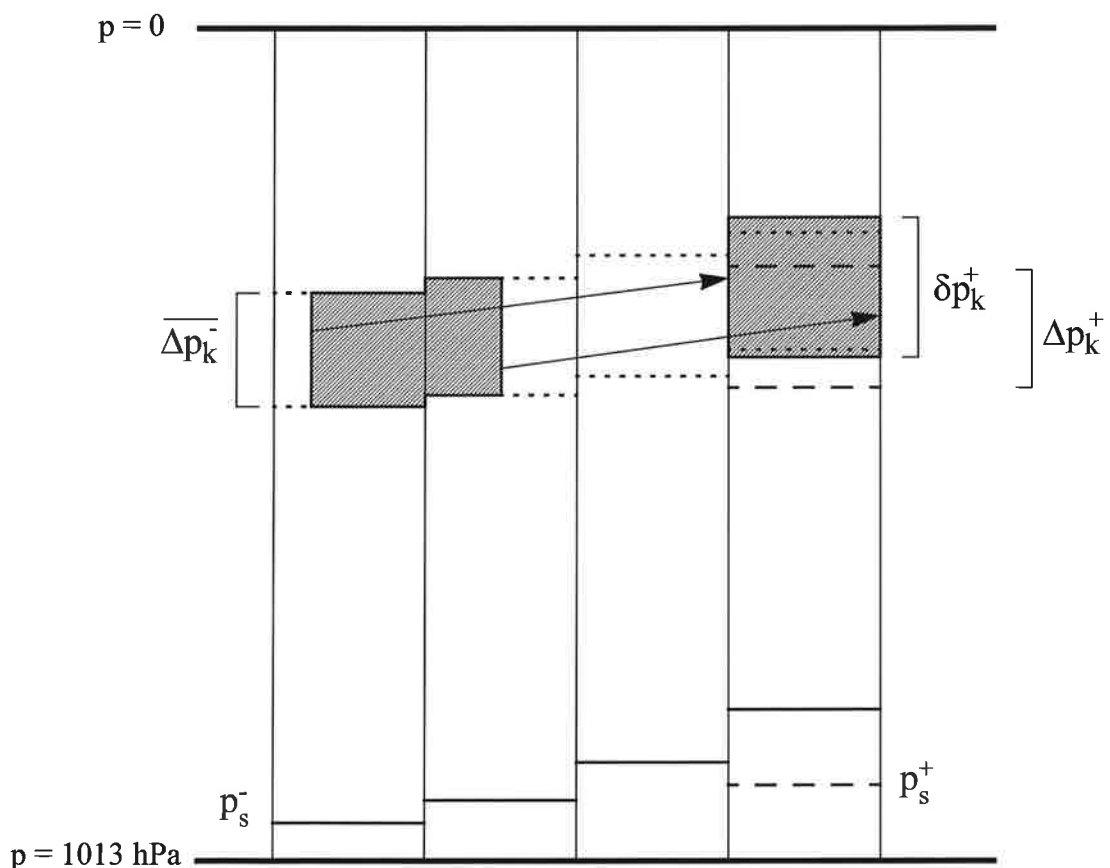
aber recht viel Rechenzeit benötigen, daher wird in *Machenhauer und Olk (1998)* eine effizientere Methode vorgeschlagen. Diese basiert darauf lediglich horizontale Zellen, wiederum mit vertikalen Seitenflächen, zu transportieren und die vertikalen Druckintervalle vorwärts in der Zeit zu extrapolieren. An die Stelle von Gleichung (7.1) tritt dann

$$\delta p_k^+ \Delta A^+ = \overline{\Delta p_k^-} \delta A_k^- \quad (7.3)$$

Hierin sind  $\delta p_k^+$  die zeitlich extrapolierten vertikalen Druckdifferenzen. Summiert man diese über alle Schichten auf erhält man den neuen Bodendruck

$$p_s^+ = \sum_{k=1}^{\text{NLEV}} \delta p_k^+ \quad (7.4)$$

NLEV ist die Anzahl der Schichten im Modell. Aus (7.2) kann man mit dem neuen Bodendruck die endgültigen neuen Druckintervalle berechnen. In Abb. 7.1 ist diese Prozedur graphisch dargestellt.



**Abb. 7.1** Illustration der Prozedur, die bei der Integration der Kontinuitätsgleichung verwendet wird.

Die gepunkteten Linien sind die Druckschichten zur Zeit  $t-\Delta t$  und die gestrichelten Linien die Drucklevel zum neuen Zeitpunkt. Die schraffierten Boxen repräsentieren die linke bzw. rechte Seite von Gleichung (7.3).

Die zeitliche Extrapolation der Kontinuitätsgleichung ist Grundlage für alle anderen prognostischen Variablen. Neben der horizontalen konservativen Abbildung ist dafür aber zusätzlich eine konservative Abbildung in vertikaler Richtung erforderlich. Diese erfolgt zwischen den zeitlich extrapolierten und den endgültig neuen Druckschichten. Betrachtet man zum Beispiel den Wasserdampf  $q$ , dann lautet bei einem zeitlichen Drei-Schritt-Verfahren die diskretisierte Form der prognostischen Gleichung analog zu (7.3)

$$\overline{\delta p}_k^+ \delta p_k^+ \Delta A^+ = \overline{\Delta p}_k^- \delta A_k^- + 2\Delta t \delta p_k^0 \delta A_k^0 (P_q^0 + K_q^0). \quad (7.5)$$

$P_q$  und  $K_q$  sind die parametrisierte physikalische Tendenz bzw. eine Tendenz aufgrund der Horizontaldiffusion von  $q$ . Die Bezeichnung  $\delta p$  bzw.  $\Delta p$  am Querstrich in (7.5) deutet an ob der Wert auf zeitlich extrapolierte bzw. endgültige Drucklevel bezogen ist.

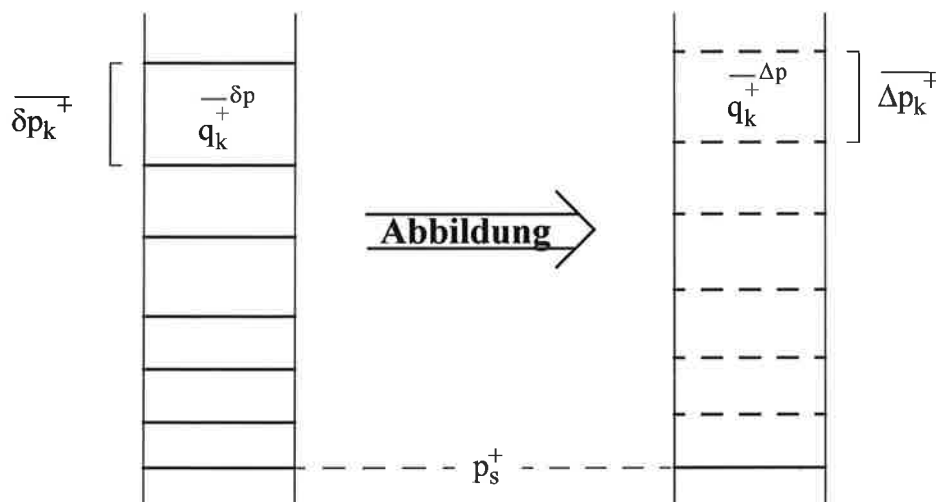


Abb. 7.2 Illustration der eindimensionalen konservativen Abbildung in vertikaler Richtung

Aus der Kontinuitätsgleichung erhält man

$$\delta p_k^+ \Delta A^+ = \delta p_k^0 \delta A_k^0 = \overline{\Delta p}_k^- \delta A_k^-, \quad (7.6)$$

so daß aus (7.5) folgt

$$q_k^{+\delta p} = \frac{\overline{q_k^-} \overline{\Delta p_k^-} \overline{\delta A^-}}{\overline{\Delta p_k^-} \overline{\delta A_k^-}} + 2\Delta t(P_q^0 + K_q^0). \quad (7.7)$$

Die konservative Abbildung in vertikaler Richtung ergibt dann  $q_k^{+\delta p}$ . In Abb. 7.2 ist dieser Schritt graphisch dargestellt, auf der linken Seite das Gitter aus den Druckschichten nach Gleichung (7.3) und auf der rechten Seite nach (7.2) mit dem neuen Bodendruck, der natürlich auf beiden Seiten gleich ist. Die beschriebene Prozedur beruht darauf, daß man nicht zu große Vertikalgeschwindigkeiten im Modell hat, da der Transport in (7.3) mit der horizontalen Geschwindigkeit vonstatten ging. Andernfalls muß die Geschwindigkeit in vertikaler Richtung interpoliert werden und die Schritte (7.3) und (7.4) in einem iterativen Prozeß wiederholt werden.

## 7.2 SLZI und semi-implizites Zeitschrittverfahren

Bisher wurde das SLZI-Verfahren stets in Zusammenhang mit dem konservativen Transport von skalaren Feldern betrachtet. Im ursprünglichen Design bei *Machenhauer (1994)* wurde das Verfahren aber sehr viel weitläufiger formuliert, von einer Anwendung auf die Flachwassergleichungen in einer und zwei Dimensionen bis hin zum vollständigen dreidimensionalen Satz der primitiven Gleichungen. Dabei wurde spekuliert, daß aufgrund der Erhaltungseigenschaften solch eines Modells die SLZI-Methode im Rahmen eines expliziten Zeitschrittverfahrens absolut stabil ist. In *Machenhauer und Olk (1997)* wurde jedoch anhand einfacher eindimensionaler Experimente mit Flachwassergleichungen gezeigt, daß diese Modelle instabil werden wenn der Zeitschritt den kritischen Wert aus dem CFL-Kriterium für Schwerewellen überschreitet. Die Amplitude der instabilen kurzen Wellen wächst weiter an, obwohl die Gesamtmasse und Gesamtimpuls bzw. Gesamtmasse und Gesamtenergie exakt erhalten sind. Man kann beobachten, daß mit größer werdender Amplitude sich die Trajektorien in einigen Punkten kreuzen was zum Verlust der Erhaltung und einige Zeitschritte später zum Zusammenbruch der Integration führt.

Damit das SLZI-Verfahren in komplexeren Modellen eingesetzt werden und mit traditionellen semi-Lagrangischen Methoden verglichen werden kann, ist es notwendig entweder ein explizites Zeitsplitting oder das semi-implizite Zeitschrittverfahren in das SLZI-Schema zu integrieren. Versuche eine SLZI-Version mit explizitem Zeitsplitting, welche entweder Masse und Energie oder Masse und Impuls erhält, zu entwickeln, waren jedoch nicht erfolgreich. Es hat sich dabei gezeigt, daß es nicht möglich ist ein Gleichungssystem aufzustellen ohne die Erhaltungseigenschaft aufzugeben. Wenn man nämlich das Gleichungssystem in den notwendigen Advektions- und Adjustementeil aufspaltet, so ist in jedem der

Subsysteme die Energie- bzw. Impulserhaltung verletzt. Da man die Erhaltungseigenschaft aber beibehalten will bleibt einem noch die Möglichkeit das semi-implizite Schema als effektives Zeitschrittverfahren mit der SLZI-Methode zu kombinieren. Die Details der sich ergebenden Gleichungen sind bei *Machenhauer und Olk (1997)* nachzulesen. An dieser Stelle werden nur die wichtigsten Aspekte diskutiert. Die Experimente wurden sowohl mit einem Gleichungssystem welches Masse und Impuls als auch mit einem System das Masse und Energie erhält durchgeführt. Beim ersten System handelt es sich um die Gleichungen

$$\frac{d}{dt} (uh\delta x) + g\delta x \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2} h^2 \right) = 0 \quad (7.8a)$$

und 
$$\frac{d}{dt} (h\delta x) = 0, \quad (7.8b)$$

$h$  ist die Höhe der Flachwasserströmung,  $t$  die Zeit,  $g$  die Gravitationsbeschleunigung,  $u$  die Geschwindigkeit in  $x$ -Richtung und  $\delta x$  ein infinitesimal kleines Längenintervall. In diesem eindimensionalen System ist  $(uh\delta x)$  der Gesamtimpuls und  $(h\delta x)$  die Gesamtmasse bis auf einen konstanten Faktor. Das zweite Gleichungssystem lautet

$$\frac{d}{dt} (E\delta x) + \delta x \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2} gh^2 u \right) = 0 \quad (7.9a)$$

und 
$$\frac{d}{dt} (h\delta x) = 0. \quad (7.9b)$$

(7.8b) und (7.9b) ist jeweils die Lagrangsche Form der Kontinuitätsgleichung, die in beiden Systemen identisch ist. Die Energie  $E = \frac{1}{2} u^2 h + \frac{1}{2} gh^2$  setzt sich zusammen aus potentieller und kinetischer Energie.

Die Schwierigkeit daraus nun ein semi-implizites Gleichungssystem zu formulieren ist zunächst einmal nicht offensichtlich. Dazu muß man sich in Erinnerung rufen wie dieser Prozeß bei einem traditionellen Flachwassersystem bestehend aus der Kontinuitätsgleichung und einer prognostischen Gleichung für die Geschwindigkeit  $u$  abläuft. Die linearen Anteile von Divergenz- und Druckgradienten werden dabei als zeitliches Mittel entlang der Trajektorien d.h. zwischen  $t+\Delta t$  und  $t-\Delta t$  formuliert, anstatt die Werte zum Zeitpunkt  $t$  am Mittelpunkt der Trajektorien zu nehmen. Beim SLZI-Schema ist dies aber so nicht möglich da der Divergenzterm nicht mehr explizit in den Gleichungen vorkommt, sondern in der Trajektorienberechnung "versteckt" ist, wie man an der Trajektoriengleichung am Gitterpunkt  $j\Delta x$

$$\delta x_j^- = \Delta x - 2\Delta t \delta u_j^0, \quad (7.10)$$

sehen kann. Verfährt man nun nach der üblichen Prozedur müßte man Trajektorien benutzen, die durch zeitlich gemittelte Winde berechnet wurden. Da zu Beginn eines Zeitschritts der Wind zur Zeit  $t+\Delta t$  nicht zur Verfügung steht, funktioniert das nicht ohne weiteres. Ein iteratives Verfahren ist zwar möglich wird aber aus Gründen des höheren Aufwands verworfen. In den Experimenten hat sich gezeigt, daß die explizit berechneten Trajektorien auch vollkommen ausreichend sind und das beschriebene Problem vernachlässigt werden kann. Die Lagrangsche Form der Flachwassergleichungen scheint sich in diesem Punkt somit als vorteilhaft herauszustellen.

Ein zweites Problem das besonderer Aufmerksamkeit bedarf ist die Tatsache, daß eine der prognostischen Variablen nichtlinear in  $u$  und  $h$  ist. Dieses Problem läßt sich durch eine Linearisierung lösen bei der die kritischen Variablen  $u$  bzw.  $h$  in einen Mittelwert und eine Fluktuation aufgeteilt werden. Nach einigen algebraischen Umformungen, die in *Machenhauer und Olk (1997)* ausführlich behandelt werden, gewinnt man die beim semi-impliziten Verfahren typische Helmholtzgleichung für  $h$ . Wenn man die Methode auf den kompletten dreidimensionalen Satz der primitiven Gleichungen ausdehnen will, muß man sich genau überlegen welches die prognostischen Variablen sein sollen. Jede prognostische Gleichung muß in der Form

$$\frac{d}{dt}(X\delta M) = F_X + \delta M S_X \quad (7.11)$$

formuliert werden.  $\delta M$  ist die Masse eines infinitesimal kleinen Volumens, das sich mit der Strömung bewegt,  $X$  ist der Mittelwert einer konservativen Variablen über dieses Volumen oder hat den Wert eins ( $X=1$  bedeutet die Kontinuitätsgleichung),  $F_X$  ist ein Fluß oder ein Druckterm der an der Oberfläche des Volumens wirkt und  $S_X$  ist schließlich ein Quellterm der innerhalb des Volumens arbeitet. Im eindimensionalen Modell können prinzipiell zwei Variablen erhalten sein, die Gesamtmasse und eine weitere, die nach den obigen Ausführungen z.B. Gesamtimpuls oder Gesamtmasse sein kann. In einem 3D-Modell kann man neben der Masse passiver Tracer sowie diverser Formen von Wasser insgesamt vier weitere Größen erhalten. Eine sinnvolle Wahl ist die Masse, der Drehimpuls, die Gesamtenergie und die totale Entrophie, wie in *Machenhauer (1994)* aufgelistet ist. Allerdings hat sich gezeigt, daß es nicht möglich ist die Gesamtenergie als prognostische Variable zu wählen wenn man das semi-implizite Zeitschrittverfahren benutzen will. Der Grund dafür ist, daß man den Ausdruck für die kinetische Energie in zwei oder drei Dimensionen nicht auf die gleiche Weise linearisieren kann wie das in einer Dimension der Fall ist.

## 8. Diskussion und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein numerisches Verfahren entwickelt, das die Vorteile des semi-Lagrangischen Zeitschrittverfahrens mit den Prinzipien der Erhaltung globaler Integralinvarianten kombiniert. Ein besonderes Merkmal der neuen Methode ist die Berücksichtigung des Erhaltungsprinzips als elementarer Bestandteil des Verfahrens anstelle einer nachträglichen Korrektur am Ende eines Zeitschritts. Ziel dabei ist es, daß diese Methode in wesentlichen Eigenschaften mit anderen numerischen Methoden konkurrieren kann und dabei zusätzlich die Erhaltung globaler Invarianten garantiert. Die Problematik gehört somit in den Bereich der Verbesserung der numerischen Grundlagen globaler Atmosphärenmodelle.

Beim klassischen semi-Lagrangischen Zeitschrittverfahren berechnet man zunächst eine Rückwärtstrajektorie vom Mittelpunkt einer Gitterzelle ausgehend. Der Startpunkt der Trajektorie liegt dann aber im allgemeinen nicht auf einem Gitterpunkt, so daß man das zu transportierende Feld am Gitterpunkt zum neuen Zeitschritt durch Interpolation des Feldes zum alten Zeitschritt am Startpunkt der Trajektorie ermitteln kann. Die Idee des semi-Lagrangischen Zellintegrationsverfahrens besteht nun darin, Rückwärtstrajektorien von den Eckpunkten einer Gitterzelle zu betrachten, deren Startpunkte dann die Ausdehnung dieser Zelle zum vorherigen Zeitpunkt festlegen. Die Werte der in Frage kommenden Felder werden dabei nicht als Gitterpunktwerte, sondern als Mittelwerte der Felder über eine Zelle angesehen. Die so konstruierten, unregelmäßigen Gitterzellen überlappen dann ganz oder teilweise mehrere Zellen des darunter liegenden, regelmäßigen Gitters. Die Variation der Variablen innerhalb einer Zelle wird durch ein Polynom beschrieben. Das Integral dieses Polynoms über die ganze Zelle ist dabei gleich dem Mittelwert des Feldes über die Zelle. Um den Mittelwert zum neuen Zeitpunkt auszurechnen, muß man das skalare Feld stückweise über alle Teilzellen des regelmäßigen Gitters, die von einem allgemeinen Viereck des unregelmäßigen Gitters überdeckt werden, integrieren und die Teilintegrale aufsummieren. Setzt man weiterhin periodische Randbedingungen voraus, was auf der Kugeloberfläche der Fall ist, erhält man ein numerisches Verfahren, welches beispielsweise die Gesamtmasse eines chemischen Spurenstoffs oder die Masse von Wasserdampf erhält. Da sowohl das unregelmäßige Gitter zum alten Zeitpunkt, als auch das regelmäßige Gitter zum neuen Zeitpunkt die Kugeloberfläche vollständig bedecken, kann bei dem beschriebenen Verfahren keine Masse verloren gehen. Der Advektionsprozeß mittels des Zellintegrationsverfahrens bedeutet daher im Grunde eine lokale Umverteilung von Masse zwischen zwei Gittern, die beide die Kugel bedecken.

Wie bei der Entwicklung eines numerischen Verfahrens üblich, wurde die Idee schrittweise weiterentwickelt und nach jeder größeren Veränderung durch geeignete Tests verifiziert, ob das angestrebte Ziel erreicht wurde oder eine Änderung im Design des neuen Verfahrens notwendig war. Ein Vergleich mit einer klassischen semi-Lagrangischen Interpolation wurde ebenso in jedem Teilschritt vollzogen.

Um erste Eigenschaften der Zellintegrationsmethode zu untersuchen, wurden einfache Transportexperimente in einer Dimension durchgeführt. So konnte im Experiment bestätigt werden, daß alle Fehler kleiner werden, desto höher der Grad des verwendeten Polynoms ist, da die Variation des skalaren Feldes innerhalb einer Gitterbox genauer wiedergegeben werden kann. Durch Zusatzbedingungen ließ sich bei linearen und quadratischen Funktionen eine positiv definite oder gar eine streng monotone Lösung erzwingen, allerdings auf Kosten einer etwas größeren Dämpfung. Die Experimente haben gezeigt, daß es keine prinzipiellen Unterschiede zwischen dem Transport eines Dreiecksignals oder etwa eines Rechtecksignals gibt. Es zeigt sich lediglich, daß die formale Genauigkeit der Methode um so höher ist, je glatter das zu transportierende Feld ist. Vergleicht man die Experimente mit einem semi-Lagrangischen Interpolationsverfahren, wie z.B. der kubischen Interpolation, wird folgendes deutlich: Das Zellintegrationsverfahren mit linearen Funktionen ist vergleichbar mit semi-Lagrangischer kubischer Interpolation was die numerische Genauigkeit betrifft. Verwendet man jedoch quadratische Funktionen ist das Zellintegrationsverfahren die genauere Methode. Bei konstanten Funktionen hingegen wurde sowohl im Experiment als auch formal nachgewiesen, daß bei konstanter Strömung das Zellintegrationsverfahren äquivalent zu semi-Lagrangischer linearer Interpolation bzw. dem klassischen "forward-upstream-Verfahren" ist. Unabhängig von der Wahl der Funktionen blieb die Gesamtmasse während des Transports exakt erhalten.

Der nächste Schritt bestand darin die neue Methode auf zwei Dimensionen auszudehnen und die bisher gewonnen Erkenntnisse zu überprüfen. Dabei wurde deutlich, daß das Konzept in zwei Dimensionen übertragen relativ aufwendig war. Bei der Berechnung von biquadratischen Funktionen sind pro Gitterzelle z.B. neben dem Zellmittelwert noch acht Koeffizienten zu berechnen und daran anschließend ein recht aufwendiges Verfahren zur Abbildung zwischen dem unregelmäßigen und dem regelmäßigen Gitter. Dieses Konzept verbraucht dann etwa 2,5 mal soviel Rechenzeit wie die semi-Lagrangische bikubische Interpolation. Schließlich wurde ein effizienterer Weg gefunden, bei dem das zweidimensionale Verfahren auf sequentielles Anwenden eindimensionaler Integrationen zurückgeführt werden konnte, was die Anzahl der zu berechnenden Koeffizienten pro Gitterzelle ungefähr halbierte. Mit dem Konzept der akkumulierten Masse einer Linie konnte die konservative Abbildung wesentlich vereinfacht werden, so daß man auch die Anzahl der not-



wendigen Integrationen verringern konnte, was ebenfalls zur Steigerung der Effizienz beigetragen hat. Dieses Konzept geht davon aus, daß man zunächst als Ursprungslinie die  $\eta$ -Koordinatenachse wählt. Die akkumulierte Masse einer Strecke ist dann die gesamte Masse links von dieser Strecke bis zur Koordinatenachse. Die Masse innerhalb einer Gitterzelle dessen Seiten parallel zu den Koordinatenachsen liegen und durch gerade Linien approximiert sind, ist dann gleich der akkumulierten Masse der rechten Seite minus der akkumulierten Masse der linken Seite. Die Wahl gerader Linien stellt sicher, daß die Fläche der Zelle unverändert bleibt. Daher war es möglich mit Hilfe der akkumulierten Masse eine allgemein gültige Beziehung für die Masse innerhalb eines beliebigen Vierecks abzuleiten, die allein die Koordinaten der Eckpunkte des Vierecks und die Koeffizienten der Funktionen im regelmäßigen Gitter als bekannte Größen benutzt. Eine Analyse der Beziehung ergab, daß sich in ihr ein Beitrag von jeder Seite des Vierecks widerspiegelt der mit bestimmtem Vorzeichen in die Summe eingeht. Jeder dieser Beiträge fand sich im angrenzenden Nachbarviereck mit umgekehrtem Vorzeichen wieder, so daß man netto pro Gitterzelle nur zwei Beiträge zu berechnen hatte.

Als Test zur Verifizierung des Zellintegrationsverfahrens in zwei Dimensionen wurde wiederum ein Standardexperiment, nämlich die Rotation eines Zylinders um den Mittelpunkt eines begrenzten ebenen Gebietes herangezogen. Die Erkenntnisse aus den eindimensionalen Experimenten bzgl. der Ordnung der verwendeten Polynome und der numerischen Genauigkeit sowie der Vergleich mit semi-Lagrangscher bikubischer Interpolation konnten auch in zwei Dimensionen bestätigt werden. Weiterhin konnte festgestellt werden, daß die Reihenfolge der Integrationen, zuerst in  $\xi$ -Richtung und danach in  $\eta$ -Richtung oder umgekehrt, keinen Einfluß auf die Lösung hat. Die Aufspaltung in eindimensionale Operatoren hat allerdings dazu geführt, daß die Lösung nun nicht mehr positiv definit war, obwohl die jeweiligen eindimensionalen Funktionen für sich genommen diese Bedingung erfüllten. Die zweidimensionale Prozedur bringt nämlich implizit die Variation der Masse entlang der Diagonalen einer Gitterzelle ins Spiel. Allerdings ist diese Variation in  $\eta$ -Richtung nicht einheitlich was zur Folge hat, daß Eigenschaften wie Positivität oder Monotonie dann nur bei Integration über eine ganze Zelle gewährleistet sind. In der Praxis wird jedoch meistens nur über Teilbereiche einer Zelle integriert. In dieser Arbeit wurde Positivität der Lösung deshalb durch ein lokal modifiziertes "hole-filling"-Verfahren erzwungen.

An dieser Stelle sei aber ein Ausblick auf eine elegantere Lösung gestattet als das in dieser Arbeit verwendete "hole-filling"-Verfahren: Interpretiert man nämlich die Beiträge der verschiedenen Seiten als Fluß durch die Begrenzungen des Viereck, so kann man möglicherweise durch Fluß-korrigierten Transport eine positiv definite oder gar monotone Lösung erzielen. Im Prinzip würde es bedeuten, daß die monotone oder positiv definite Lösung zwi-

schen den quadratischen Funktionen und den konstanten Funktionen liegt. Die genaue Prozedur muß allerdings noch im Detail formuliert und getestet werden.

Die Erweiterung auf sphärische Geometrie war nun ein wichtiger, ganz neuer, Entwicklungsschritt. Formal konnte das in der Ebene entwickelte 2D-Verfahren zunächst ohne Veränderung auf die Kugel übertragen werden, wenn man die geographische Länge und den Sinus der geographischen Breite als Koordinaten wählt. Die Seiten der Vierecke, die in diesem Koordinatensystem als gerade Linien angenommen wurden, sind mit dieser Wahl in guter Näherung Bogenstücke von Großkreisen, wenn man weit genug von den Polen entfernt ist. Das Experiment bestand in diesem Fall aus dem Standardtest der Advektion einer kosinusförmigen Glockenfunktion über den Nordpol, den Äquator und in kleinen Winkeln abweichend von diesen Extremen. Nach einigen Versuchen stellte sich aber heraus, daß die große Krümmung und Drängung der Koordinatenlinien in Polnähe einer gesonderten Behandlung bedarf, da die Glockenfunktion bei der Überquerung des Pols stark deformiert wird. Eine gerade Linie zwischen zwei Eckpunkten ist in der Nähe des Pols kein Bogenstück eines Großkreises mehr und die Flächenstücke der unregelmäßigen Gitterzellen werden falsch repräsentiert. Das Problem konnte dadurch gelöst werden, indem man den Verlauf des Bogenstücks durch die Berechnung weiterer Hilfspunkte genauer bestimmt hat. Dies bedeutet aus geometrischer Sicht, daß eine Gitterzelle des unregelmäßigen Gitters in mehrere Teilflächen unterteilt wurde. Damit war die falsche Repräsentation der Gitterzelle zwar korrigiert aber im zeitlichen Verlauf der verschiedenen Fehlermaße war der Zeitpunkt der Polüberquerung deutlich durch einen sprunghaften Ausschlag zu erkennen. Mit Hilfe eines Polfilters, der auf die Gitterpunktwerte einen glättenden Einfluß hatte, konnte der Ausschlag deutlich reduziert werden, weil die dichte Drängung der Koordinatenlinien nun kompensiert wurde.

Nach dieser Modifikation zeigte das Zellintegrationsverfahren auch auf der Kugeloberfläche das nunmehr bekannte Verhalten. Der Transport in kleinen Winkeln abweichend von dem direkten Weg über den Pol bzw. entlang des Äquators bewies ferner, daß das neue Verfahren auch bei asymmetrischem Strömungsfeld die erwarteten Resultate lieferte und nicht zufällig auf die Überquerung des Pols hin optimiert wurde. Experimente mit verschiedenen Auflösungen zeigten wie erwartet, daß die Genauigkeit der numerischen Lösung mit steigender Auflösung zunimmt. Dies war auch erwartet, da die funktionale Darstellung der Verteilung eines skalaren Feldes in kleineren Gitterzellen realistischer ist.

Neben all den beobachteten positiven Eigenschaften war aber am wichtigsten, daß zusätzlich die exakte Erhaltung der Masse des skalaren Feldes über den gesamten Zeitraum der Integration gegeben war. Im Vergleichsexperiment, der semi-Lagrangischen bikubischen

Interpolation war hingegen ein systematischer Massenverlust zu beobachten. Der Preis für diesen Gewinn ist eine etwas höhere Rechenzeit. Zieht man lineare Funktionen in Betracht, was in puncto Genauigkeit der bikubischen Interpolation entspricht, so ist der Aufwand nur um den Faktor 1,2 höher. Nimmt man jedoch quadratische Funktionen, die in diesem Zusammenhang einer großen Genauigkeit entsprechen, ist die Rechenzeit etwa um den Faktor 1,65 größer als im Vergleichsexperiment. Das erscheint auf den ersten Blick sehr viel, bedenkt man allerdings, daß die adiabatischen Prozesse in einem vollständigen Atmosphärenmodell nur einen kleinen Anteil der Rechenzeit beanspruchen, relativiert sich der Mehraufwand wieder.

Das zentrale Problem war die zuverlässige Formulierung des Zellintegrationsverfahrens auf der Kugeloberfläche insbesondere in Polnähe. Die in dieser Arbeit vorgeschlagene Lösung konnte die gestellten Anforderungen gut erfüllen, weist aber dennoch einige Mängel auf. Zum einen ist es unbefriedigend, wenn einige Breitenkreise anders behandelt werden müssen als die übrigen. Außerdem besteht eine gewisse Willkür bis zu welchem Breitenkreis diese Sonderbehandlung stattfinden soll. Die Komplexität der modifizierten Prozedur macht sie etwas unflexibel im Bezug auf Änderungen des Gitters, wie es beispielsweise mit der Einführung eines reduzierten Gaußschen Gitters der Fall wäre. Der nächste Schritt bei der Weiterentwicklung der Zellintegrationsmethode sollte noch einmal dem Polproblem gewidmet werden um die Prozedur zu vereinfachen. Die Möglichkeiten reichen von einem anderen Koordinatensystem, wie zum Beispiel ein Dreiecksgitter bis zu einer ähnlichen Koordinatentransformation, wie es bei der Berechnung der Trajektorien der Fall ist. Bei diesen Überlegungen ist es aber wichtig, daß man im Endeffekt ein globales Koordinatensystem verwenden kann. Hat man lokal verschiedene Systeme, so ist es nicht ohne weiteres möglich Beiträge zur Masse eines Vierecks im Nachbarviereck mit umgekehrtem Vorzeichen wiederzuverwenden und damit Massenerhaltung zu gewährleisten.

Im letzten Experiment wurde überprüft, ob die Methode auch mit realen Daten die gewünschten Eigenschaften liefern konnte. Dazu wurde ein Testfall ausgesucht, der für eine Periode von zwölf Tagen in guter Näherung adiabatische und reibungsfreie Bedingungen und somit eine horizontale Strömung bot. Das zu transportierende Feld war, stellvertretend für eine beliebiges skalares Feld, Ertel's potentielle Vorticity und das Strömungsfeld führte zu einer permanenten Umströmung des Nordpols. Im Vergleich, wiederum mit semi-Lagrangischer bikubischer Interpolation sowie Reanalysedaten wurde ein realistischer Transport simuliert, wobei die SLZI-Methode eine detailliertere Verteilung lieferte.

Zum Abschluß wurde noch gezeigt wie eine Erweiterung auf drei Dimensionen für ein hydrostatisches Atmosphärenmodell aussehen kann. Wenn dieser Schritt realisiert ist steht

ein vollständiges, konservatives, semi-Lagrangsches Transportschema zur Verfügung. Weitergehende Überlegungen die Idee auf Flachwassergleichungen und sogar auf die kompletten primitiven Gleichungen auszudehnen wurden ebenfalls angestellt. So ist es möglich, wie in eindimensionalen Experimenten gezeigt wurde, das semi-implizite Zeitschrittverfahren mit der Zellintegrationsmethode zu kombinieren. Das ist ein wichtiger Schritt auf dem Weg zu einem effizienten konservativen Verfahren für die elementaren prognostischen Variablen, denen ein physikalisch begründetes Erhaltungsprinzip zugrunde liegt.

## Danksagung

Das Zustandekommen einer solchen Arbeit wird von verschiedenen Faktoren beeinflusst die aufzuzählen nicht ganz einfach ist. Neben der Arbeitsatmosphäre und den äußeren Bedingungen ist die Hilfe und Unterstützung anderer am aller wichtigsten, weshalb ich vielen Menschen zu Dank verpflichtet bin. Ich bitte um Nachsicht, daß ich nicht alle Personen die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben, namentlich erwähne.

Mein Dank gilt Bennert Machenhauer für die Themenstellung und die kontinuierliche Betreuung der Arbeit. In zahlreichen Diskussionen habe ich immer wieder neue Motivation und Anregungen erhalten. Für die Motivation und Gelegenheit auf dem Gebiet der Klimamodellierung eine Arbeit anzufertigen danke ich ganz besonders Lennart Bengtsson.

Wenn ich zu einem neuen Gedanken gerne eine andere Meinung hören wollte, habe ich in Marco Giorgetta immer einen interessierten Gesprächspartner gefunden, der sich auch die Mühe gemacht hat einem fremden Thema mit der notwendigen Tiefe zu widmen, dafür gilt ihm mein besonderer Dank.

Für die Unterstützung im Umgang mit dem IFS-Modell danke ich ganz besonders Luis Kornblüh, Uli Schlese und Arno Hellbach, ihre Hilfe und Anregungen waren für mich wertvoll. Bei Fragen zur Bereitstellung und Aufbereitung von Reanalysedaten konnte ich mich stets an Marco Giorgetta und Martin Stendel wenden. Für die Bereitstellung des IFS-Modells danke ich den verantwortlichen Personen beim Europäischen Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage.

Nicht vergessen möchte ich Swantje Heinemeier, Katharina Herrmann und Heiko Werner, die mir während der Niederschrift wichtige Unterstützung gewährt haben. Für die mühevollen Aufgabe der Korrektur hinsichtlich Rechtschreibung und Zeichensetzung möchte ich mich herzlich bei Jeannette Lukath bedanken. Mit dem Dank an alle meine Freundinnen und Freunde, die insbesondere in der Schlußphase der Arbeit zur Lebensfreude und zum Spaß beigetragen möchte ich diesen Abschnitt beschließen.



## Anhang A: Interpolation nach Newton-Gregory

Das allgemeine Interpolationspolynom vom Grad 4,  $p_4(x)$  ist nach Newton-Gregory gegeben durch

$$\begin{aligned} p_4(x) = & c_0 + c_1(x-x_0) + c_2(x-x_0)(x-x_1) \\ & + c_3(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \\ & + c_4(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3) \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

$x$  ist die Interpolationsstelle,  $x_1, \dots, x_4$  sind die Stützstellen der Interpolation. Die Koeffizienten sind

$$c_0 = y_0 \quad (\text{A2})$$

$$c_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \quad (\text{A3})$$

$$c_2 = \frac{y_2 - y_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{y_1 - y_0}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)} \quad (\text{A4})$$

$$\begin{aligned} c_3 = \frac{1}{(x_3 - x_0)} & \left[ \frac{y_3 - y_2}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} - \frac{y_2 - y_1}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)} - \frac{y_2 - y_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \right. \\ & \left. + \frac{y_1 - y_0}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)} \right] \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

$$\begin{aligned} c_4 = \frac{1}{(x_4 - x_0)(x_4 - x_1)} & \left[ \frac{y_4 - y_3}{(x_4 - x_2)(x_4 - x_3)} - \frac{y_3 - y_2}{(x_4 - x_2)(x_3 - x_2)} \right. \\ & \left. - \frac{y_3 - y_2}{(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)} + \frac{y_2 - y_1}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)} \right] - \frac{c_3}{(x_4 - x_0)} \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

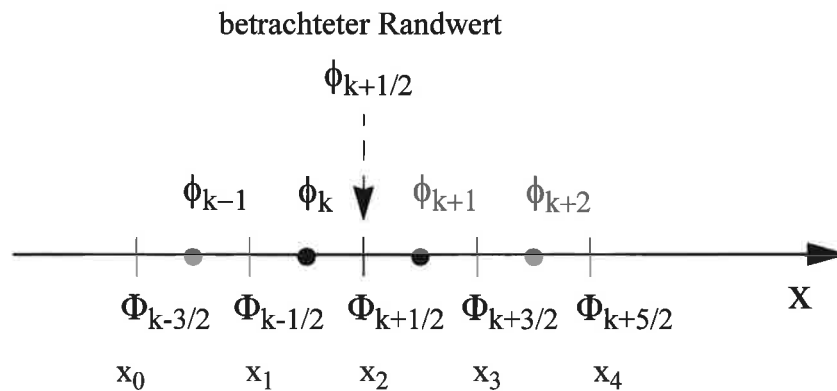
mit  $p_n(x_i) = y_i$  für  $i = 0, \dots, 4$ . Nun sei die Aufgabe gegeben den Randwert  $\phi_{j+1/2}$  einer Gitterbox  $j$  zu berechnen. Dazu interpoliert man zunächst ein Polynom 4. Ordnung durch die Menge der Punkte  $(x_{j+k+1/2}, \Phi_{j+k+1/2})$ ,  $k = 0, \pm 1, \pm 2$ . und differenziert es an der Stelle  $x = x_{j+1/2}$  um daraus  $\phi_{j+1/2}$

$$\phi_{j+1/2} = \left. \frac{d}{dx} \Phi^4(x) \right|_{x=x_{j+1/2}} \quad (\text{A7})$$

zu erhalten.  $\Phi^4$  bedeutet, daß  $\Phi$  ein Polynom 4. Ordnung ist. Zwischen  $\Phi$  und  $\phi$  bestehe weiterhin folgende Beziehung

$$\Phi(x_{j+1/2}) = \Phi_{j+1/2} = \sum_{k \leq j} \phi_k \Delta x_k. \quad (\text{A8})$$

Folgende Skizze verdeutlicht die Lage der einbezogenen Punkte:



**Abb. A.1** Lage der verschiedenen Punkte, die bei der Berechnung der Randwerte miteinbezogen werden

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\Phi^4}{x} = & c_1 + c_2(2x - x_1 - x_0) + c_3(3x^2 - 2x(x_0 + x_1 + x_2) + x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2) \\ & + c_4(4x^3 - 3x^2(x_0 + x_1 + x_2 + x_3) + 2x(x_0x_1 + x_0x_2 + x_0x_3 + x_1x_2 + x_1x_3 + x_2x_3) \\ & - (x_0x_1x_2 + x_0x_1x_3 + x_0x_2x_3 + x_1x_2x_3)) \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

und mit  $x = x_2$  folgt nach etwas Algebra

$$\phi_{k+1/2} = c_1 + 3\Delta x c_2 + 3(\Delta x)^2 c_3 - 2(\Delta x)^3 c_4. \quad (\text{A10})$$

Hierin ist 
$$c_1 = \frac{\Phi_{k-1/2} - \Phi_{k-3/2}}{\Delta x} \quad (\text{A11})$$



$$c_2 = \frac{\Phi_{k+1/2} - 2\Phi_{k-1/2} + \Phi_{k-3/2}}{2(\Delta x)^2} \quad (\text{A12})$$

$$c_3 = \frac{\Phi_{k+3/2} - 3\Phi_{k+1/2} + 3\Phi_{k-1/2} - \Phi_{k-3/2}}{6(\Delta x)^3} \quad (\text{A13})$$

und 
$$c_4 = \frac{\Phi_{k+5/2} - 4\Phi_{k+3/2} + 6\Phi_{k+1/2} - 4\Phi_{k-1/2} + \Phi_{k-3/2}}{24(\Delta x)^4} \quad (\text{A14})$$

Nach einigen Umformungen ergibt sich dann mit Gleichung (A8)

$$\begin{aligned} \phi_{k+1/2} = \phi_{k-1} &+ \frac{3}{2}(\phi_k - \phi_{k-1}) + \frac{1}{3}(\phi_{k+1} - 2\phi_k + \phi_{k-1}) \\ &- \frac{1}{12}(\phi_{k+2} - 3\phi_{k+1} + 3\phi_k - \phi_{k-1}) \end{aligned} \quad (\text{A15})$$

woraus man unmittelbar (3.39) erhält:

$$\phi_{k+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{k+1} + \phi_k) - \frac{1}{6}(\Delta\phi_{k+1} - \Delta\phi_k) \quad (\text{A16})$$

mit  $\Delta\phi_{k+1} = \frac{1}{2}(\phi_{k+2} - \phi_k)$  und  $\Delta\phi_k = \frac{1}{2}(\phi_{k+1} - \phi_{k-1})$ .



## Anhang B: Begründung von Bedingung (3.41)

Eine Parabel  $\phi(x) = cx^2 + bx + a$ , die in einem Intervall von 0 bis 1 definiert ist, hat für  $c \neq 0$  genau ein Extremum. Dieses kann innerhalb des Intervalls liegen oder aber außerhalb. Die Nullstelle der ersten Ableitung ist genau diese Extremstelle.

Aus 
$$\phi'(x) = 2c_k x_k + b_k \tag{B1}$$

erhält man 
$$x_k = -\frac{b_k}{2c_k}. \tag{B2}$$

Damit dieser Wert innerhalb des Intervalls  $[0,1]$  liegt, muß

$$0 < -\frac{b_k}{2c_k} < 1 \tag{B3}$$

gelten oder nach einer kleinen Umformung

$$0 < -(b_k + c_k) < c_k. \tag{B4}$$

Mit Hilfe von (3.38) erkennt man, daß der Ausdruck  $(b_k + c_k)$  die Differenz der Randwerte,  $\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}$  ist. Wie man durch Fallunterscheidung nun leicht nachprüfen kann, läßt sich (B4) zu

$$|\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}| < |c_k| \tag{B5}$$

zusammenfassen, welches zu begründen war.



## Anhang C: Das IFS-Modell

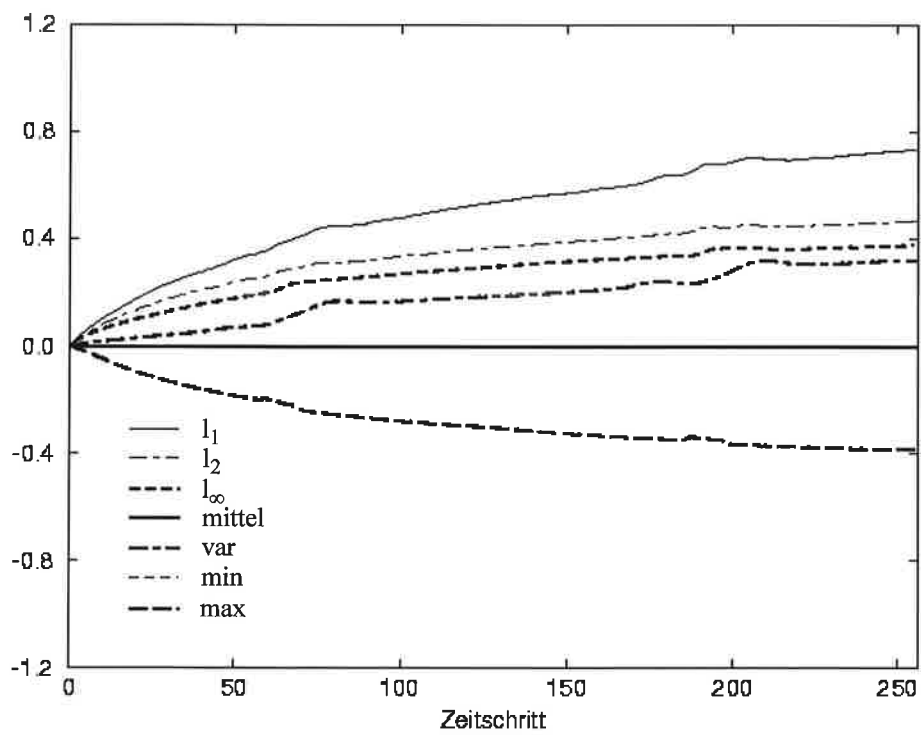
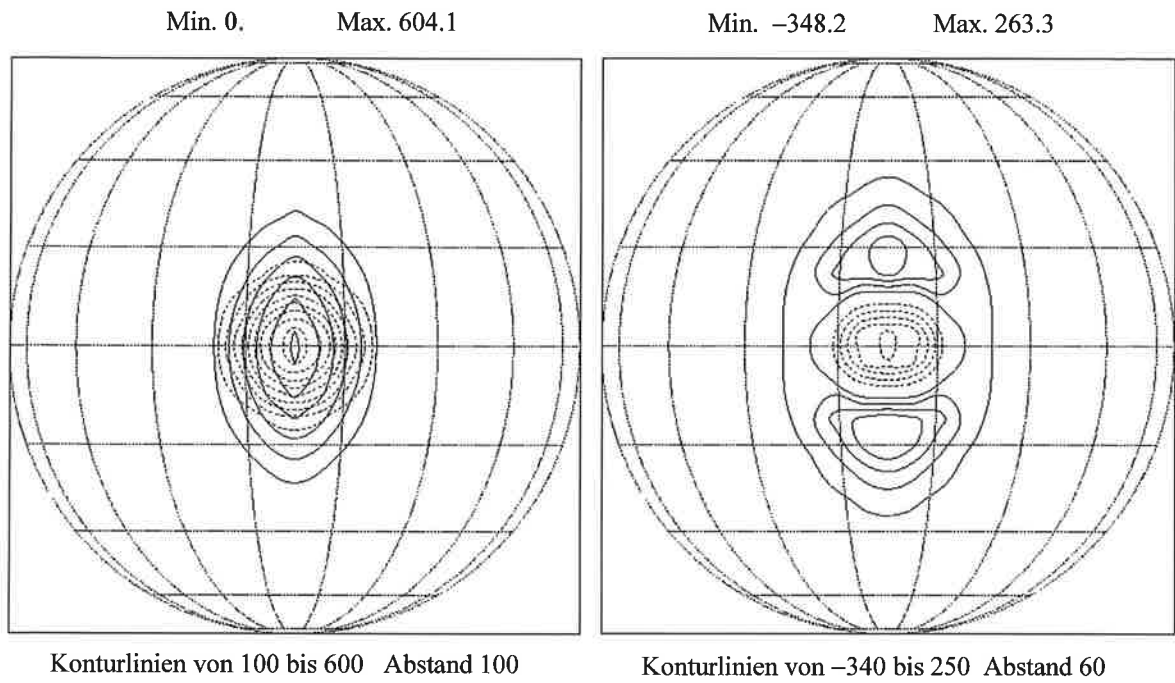
Das “Integrated Forecasting System”-Modell (IFS-Modell) ist eine auf verschiedenen Plattformen lauffähige Version des spektralen Vorhersagemodells des EZMWF. Die wichtigsten Charakteristiken dieses Modell sind:

- spektrale Transformationsmethode
- semi-Lagrangisches Advektionsverfahren
- horizontale Auflösung T21, T42, T63, T106 und T213
- vertikal 19 oder 31 Schichten
- reduziertes Gitter
- volle physikalische Parametrisierung

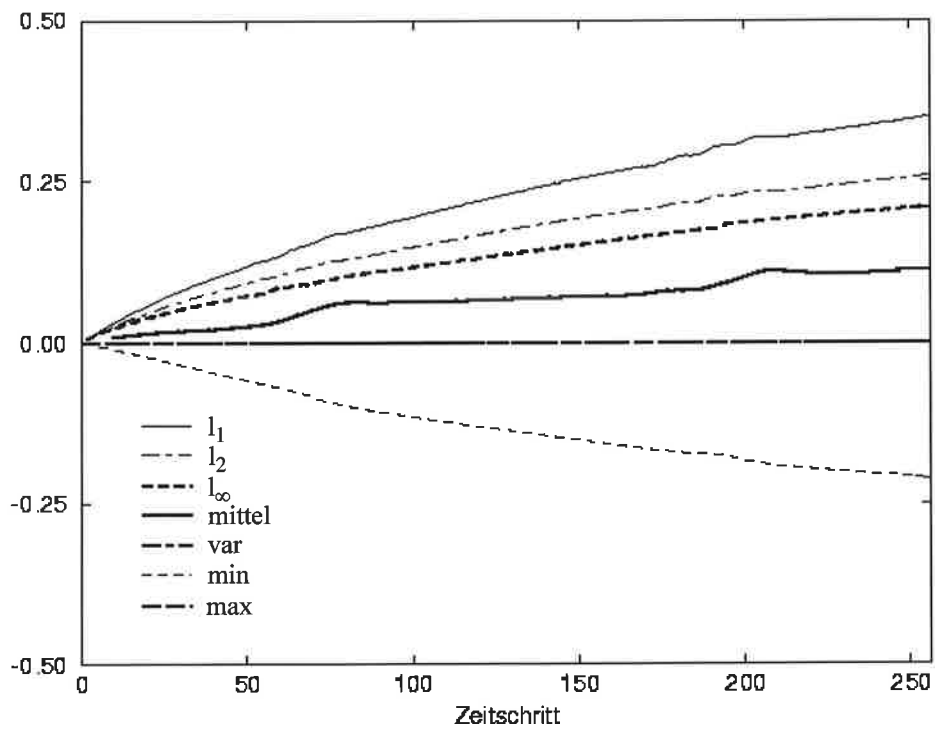
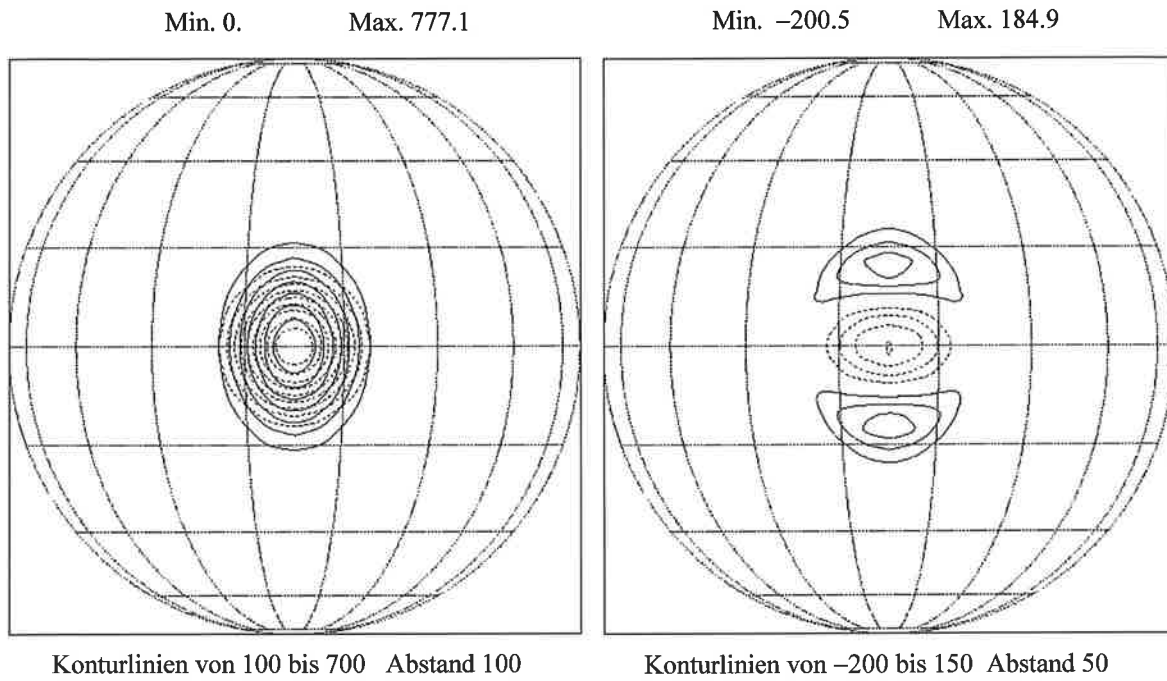
Das System beinhaltet verschiedene Modellvarianten. Ein 3D-Vorhersagemodell, ein 2D-Variante, ein 3D- und 4D-Var-Analysesystem und einige andere Komponenten mehr. Das Modell ist aus einer Kooperation zwischen EZMWF und Meteo France hervorgegangen.



## Anhang D: Ergebnisse zu Kapitel 5



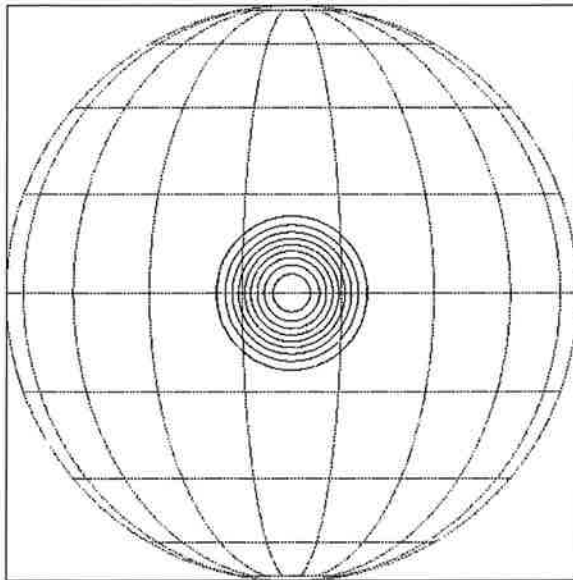
SLZI, Advektion über Nordpol, T21



SLZI, Advektion über Nordpol, T30

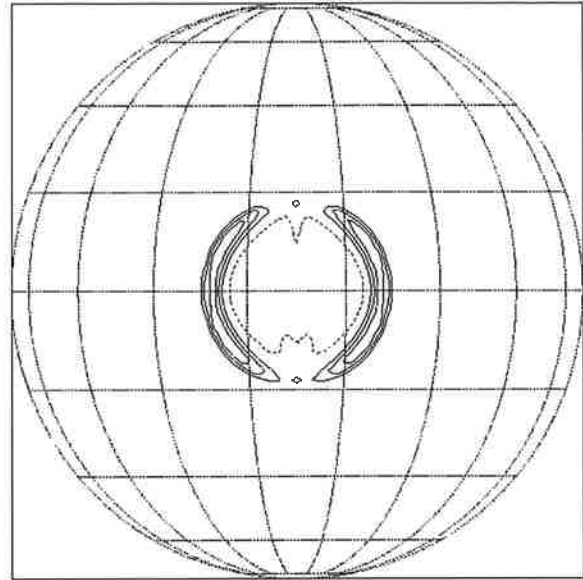


Min. 0. Max. 989.1

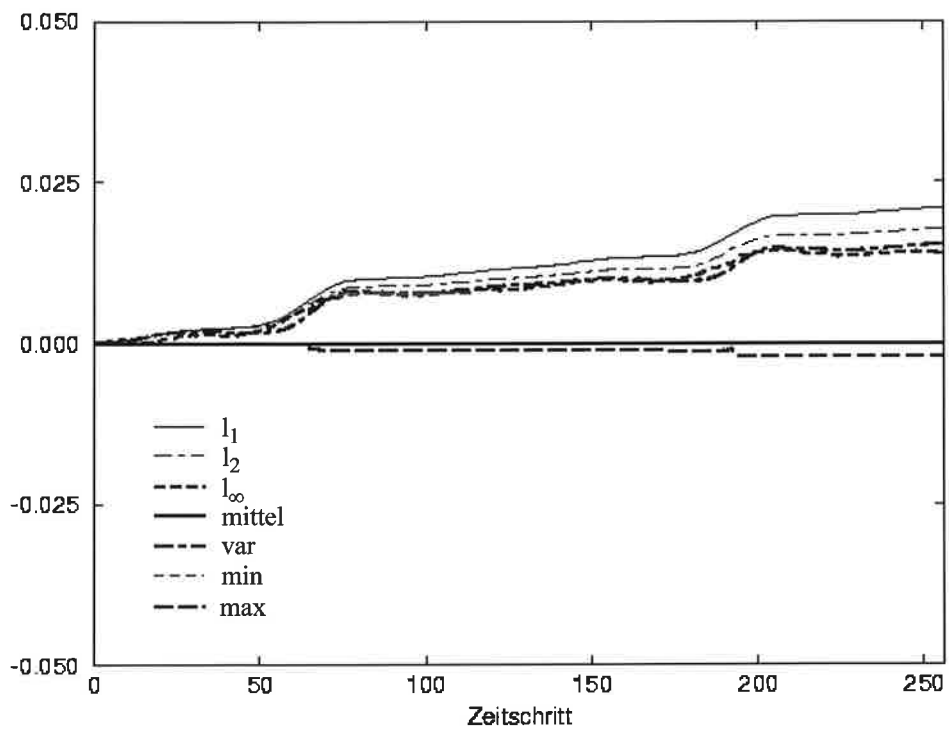


Konturlinien von 100 bis 900 Abstand 100

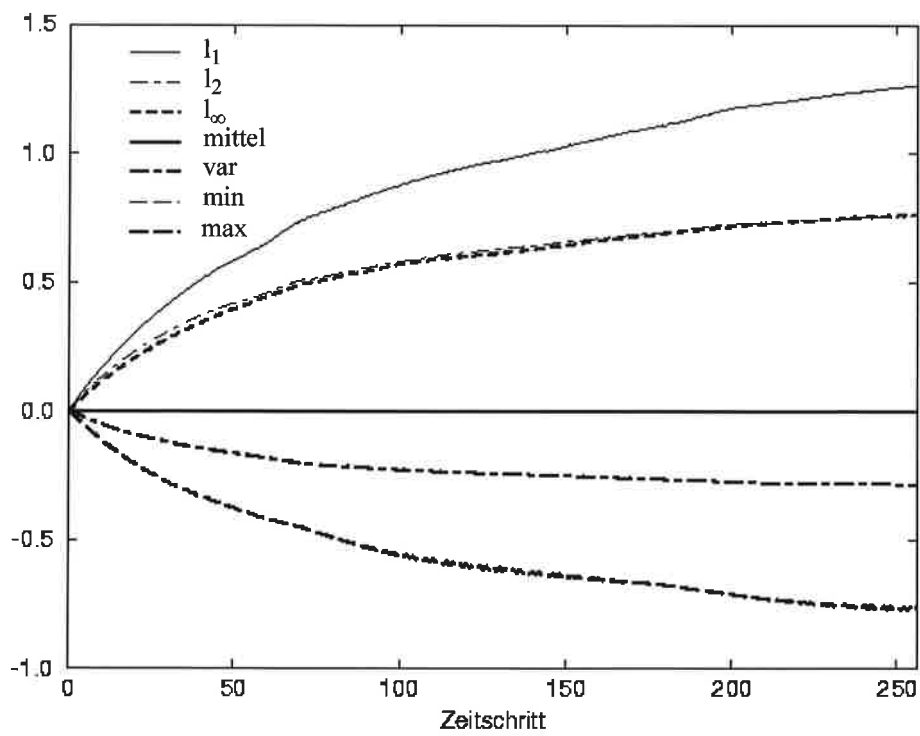
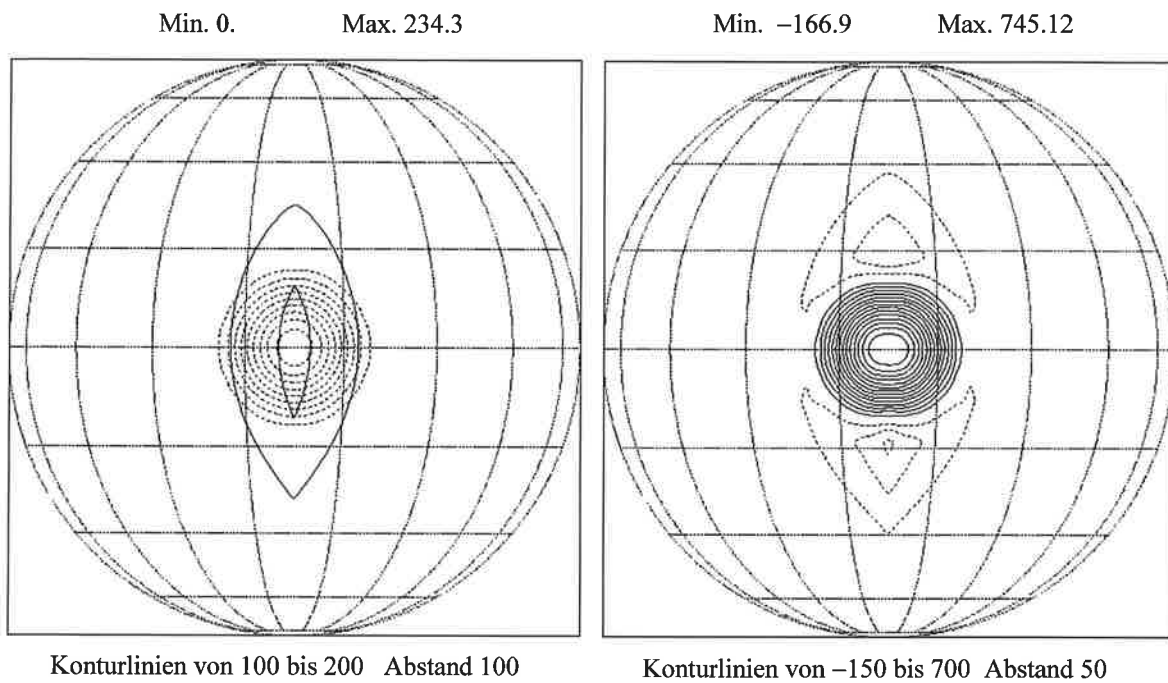
Min. -2.7 Max. 9.4



Konturlinien von -2 bis 8 Abstand 2

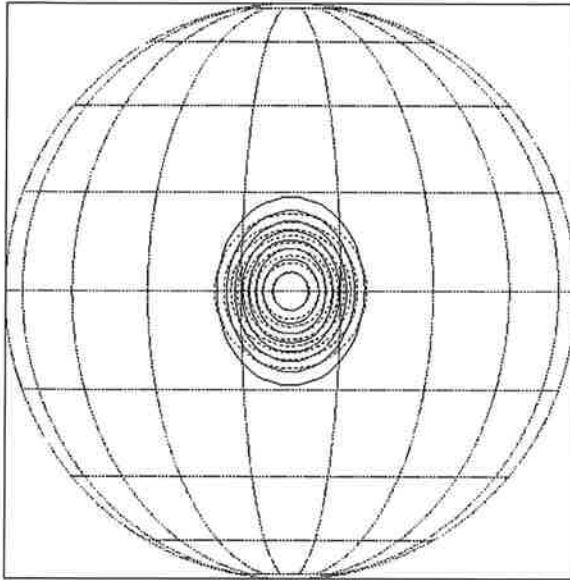


SLZI, Advektion über Nordpol, T63



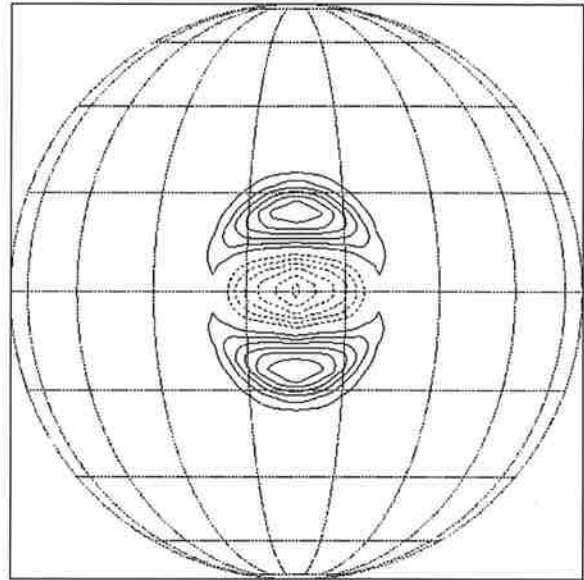
SLZI, Advektion über Nordpol, T42, konstante Funktionen

Min. 0. Max. 856.4

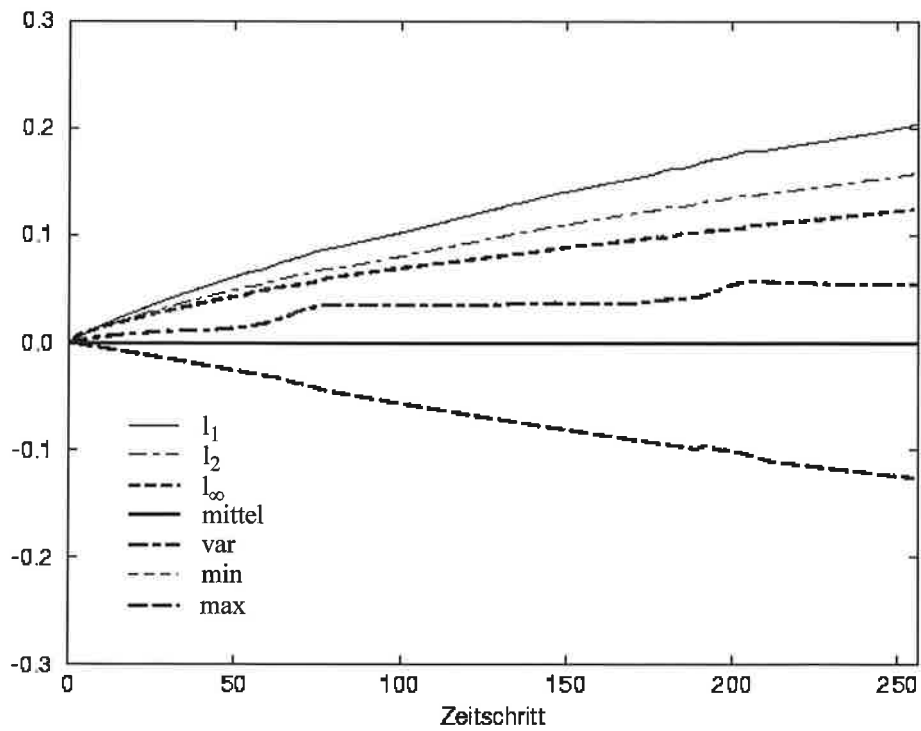


Konturlinien von 100 bis 800 Abstand 100

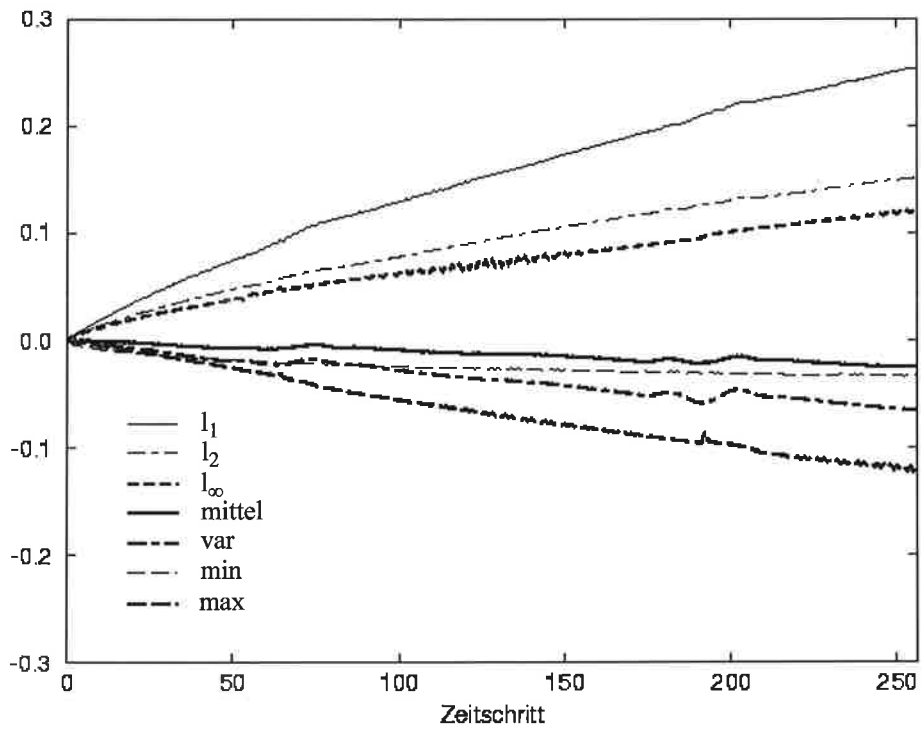
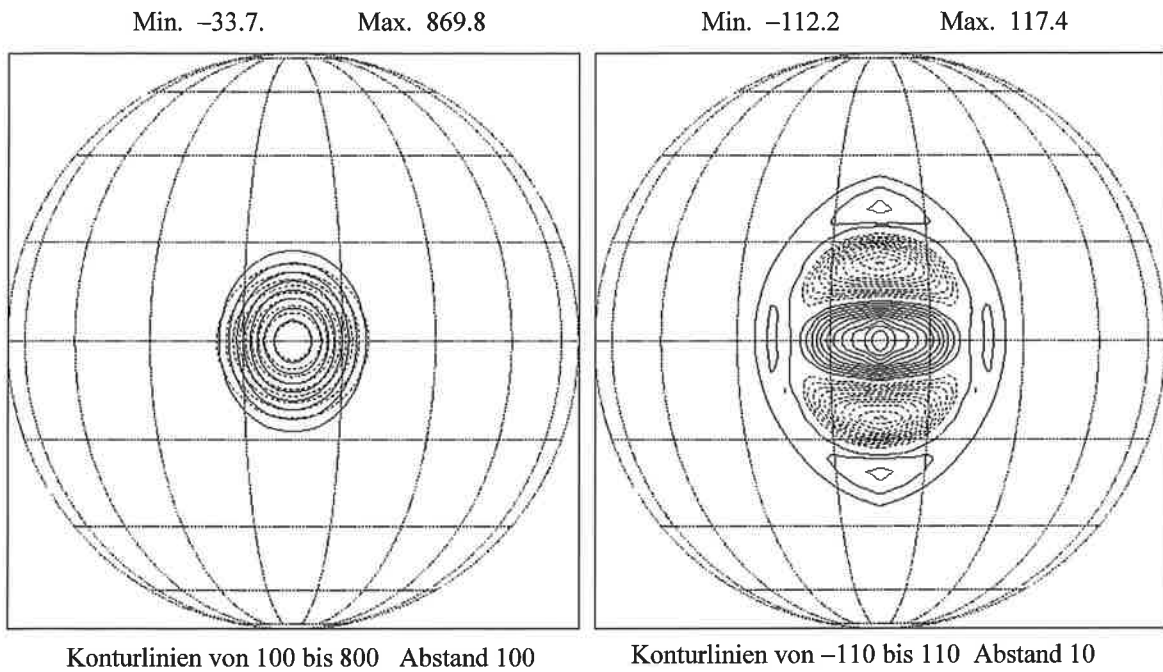
Min. -131.7 Max. 131.5



Konturlinien von -130 bis 130 Abstand 20

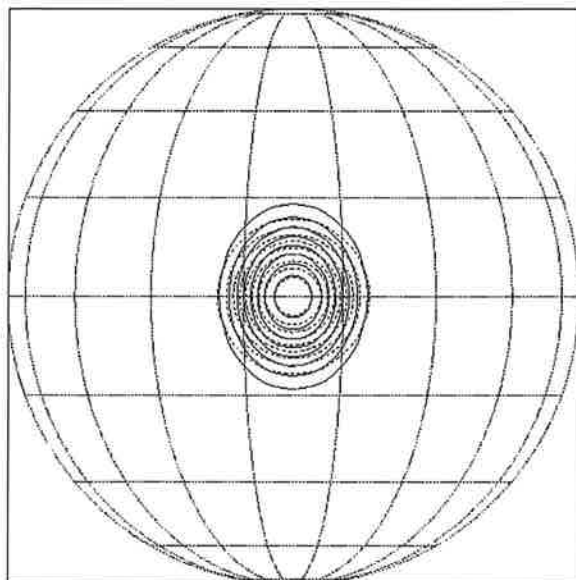


SLZI, Advektion über Nordpol, T42, lineare Funktionen



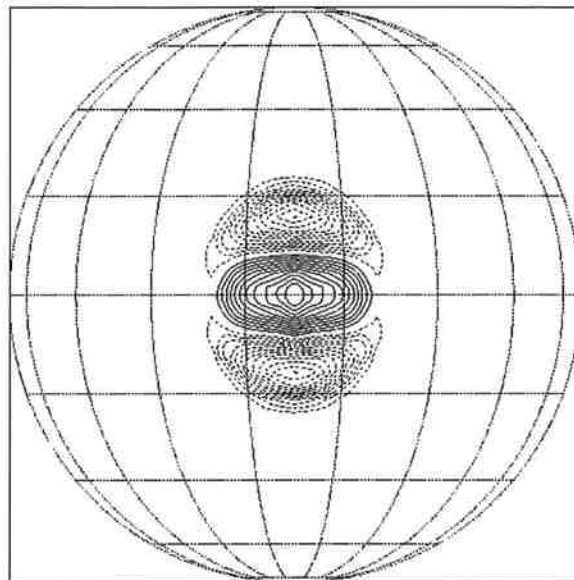
bikubische Interpolation, Advektion über Nordpol,

Min. 0. Max. 869.9

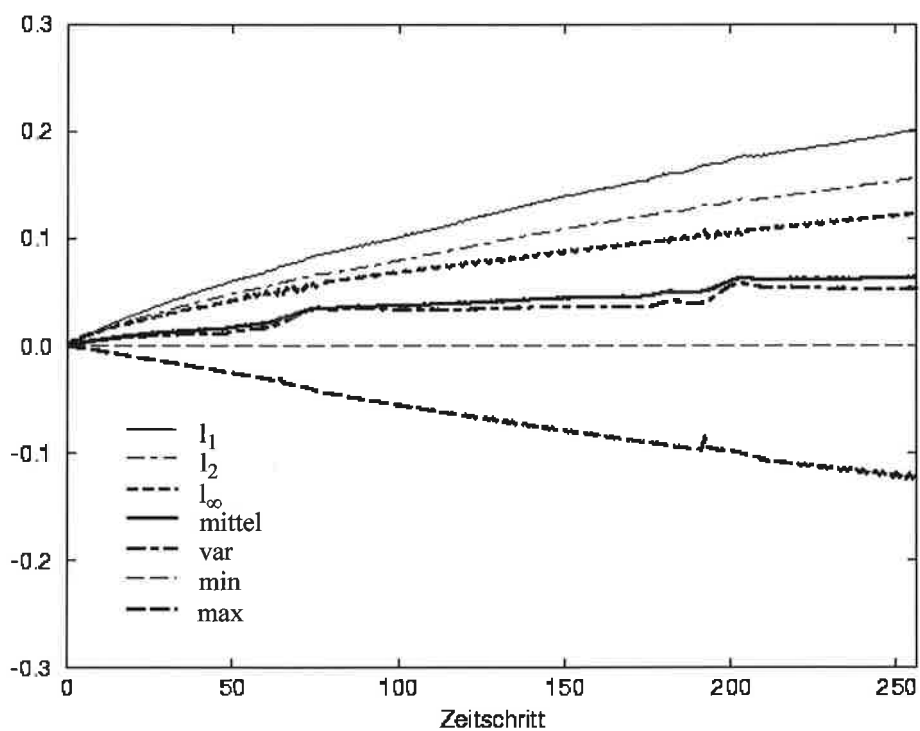


Konturlinien von 100 bis 800 Abstand 100

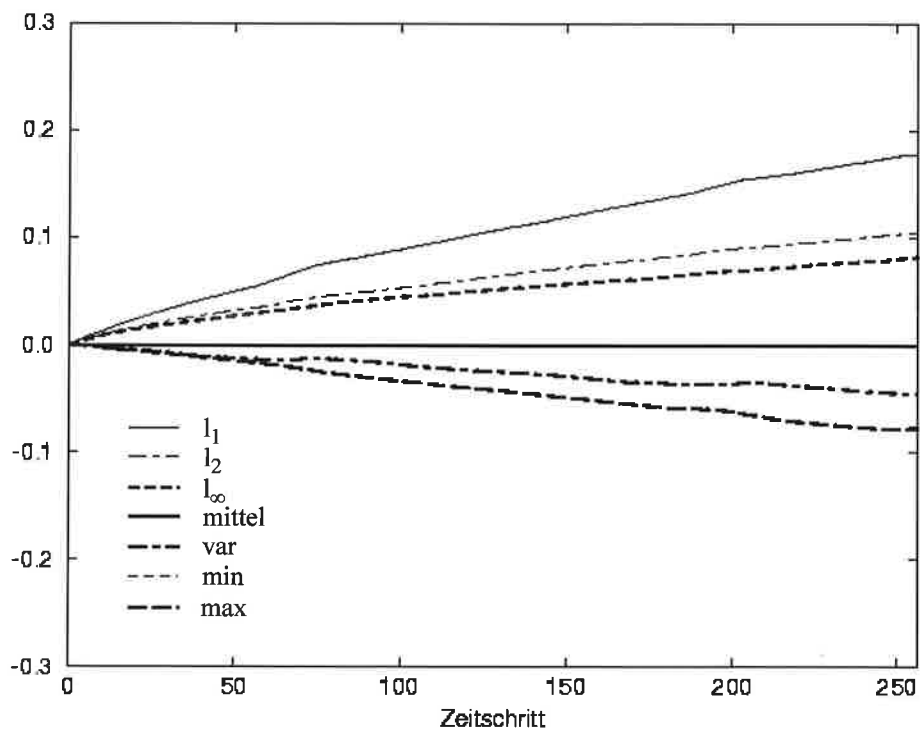
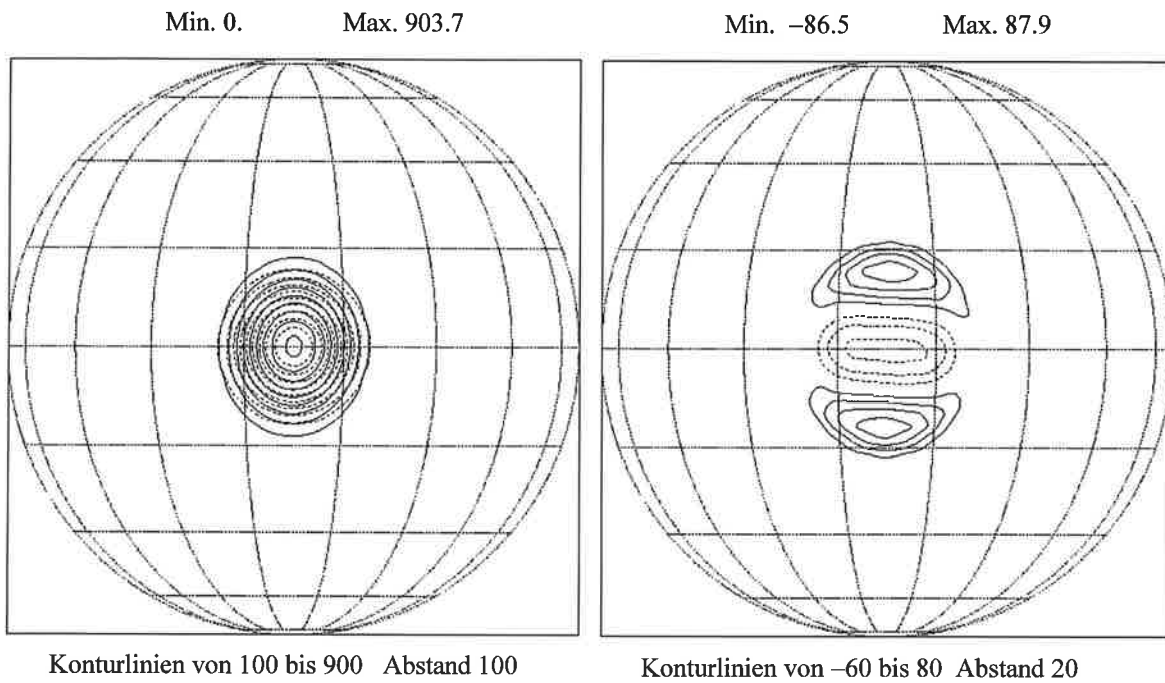
Min. -121.3 Max. 119.2



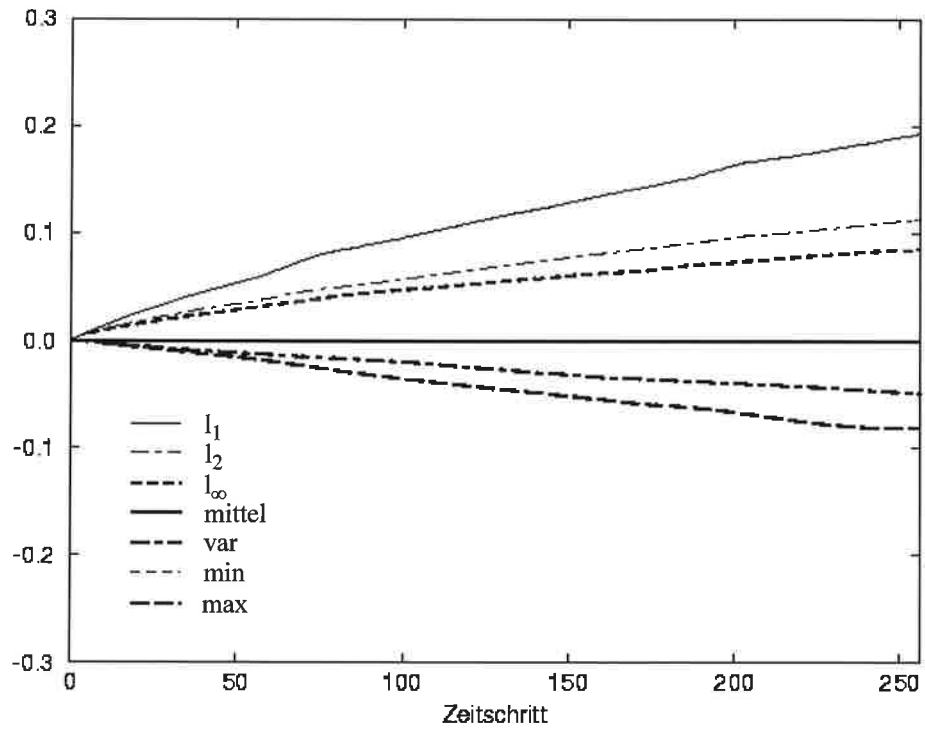
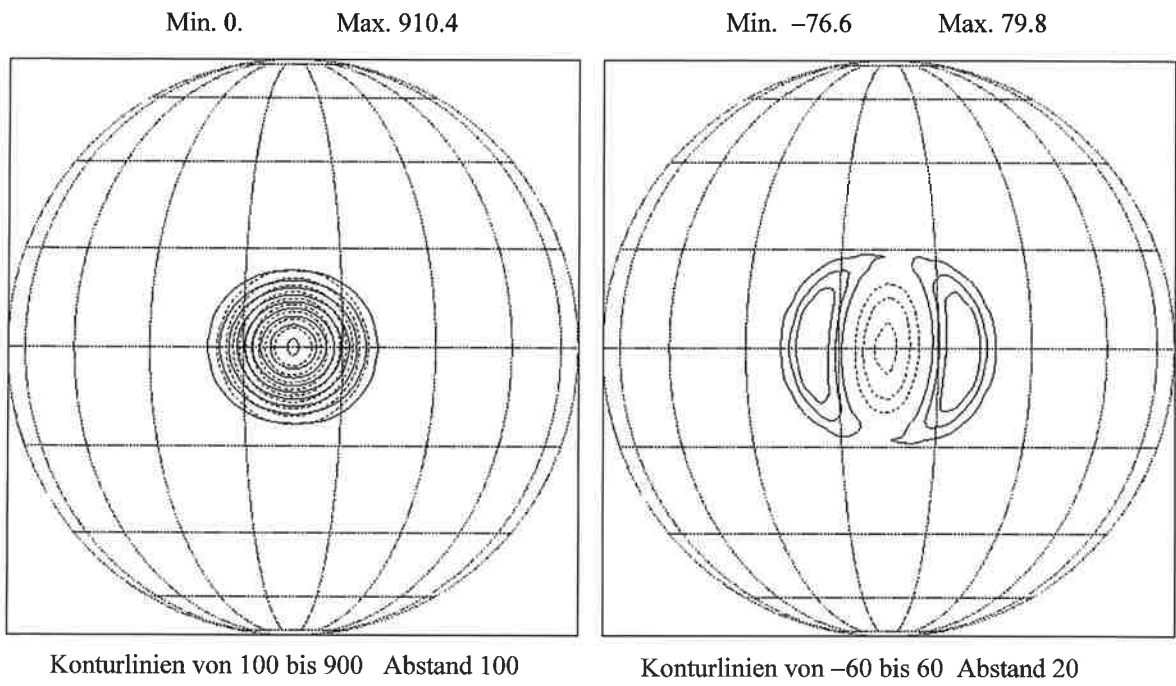
Konturlinien von -120 bis 110 Abstand 10



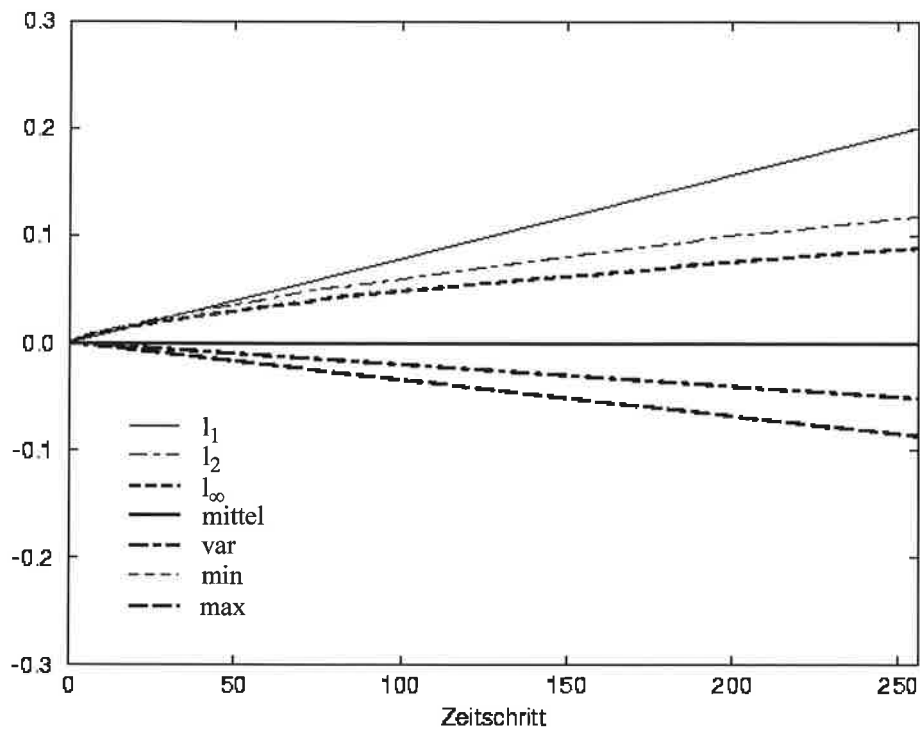
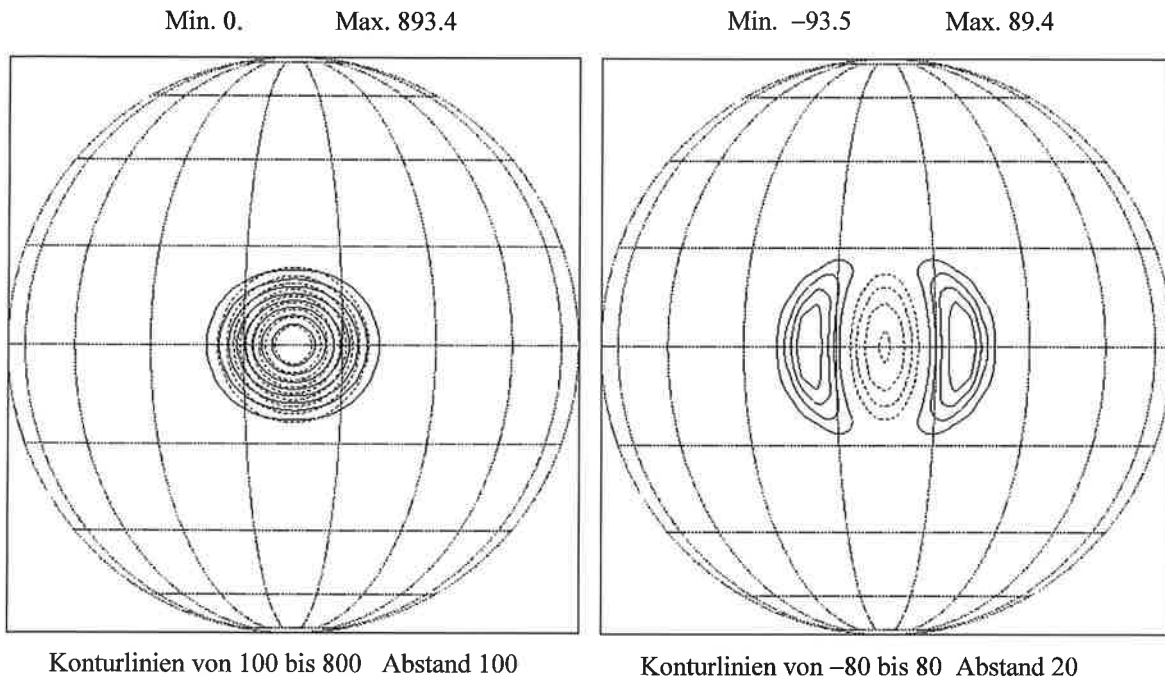
quasi-monotone bikubische Interpolation, Advektion  
über Nordpol, T42



SLZI, T42, Advektion mit  $\alpha=(\pi/2) - 0.05$



SLZI, T42, Advektion mit  $\alpha = -0.05$



SLZI, T42, Advektion mit  $\alpha=0$



## Literaturverzeichnis

- Andrews, D. G., J. R. Holton und C. B. Leovy, 1987:** Middle Atmosphere Dynamics, *Academic Press*, 489 pp.
- Allen, D. J., A. R. Douglass, R. B. Rood und P. D. Guthrie, 1991:** Application of a monotonic upstream-biased transport scheme to three-dimensional constituent transport calculations. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 2456-2464.
- Bates, J. R. und A. McDonald, 1982:** Multiply-upstream, semi-Lagrangian advection schemes: Analysis and application to a multilevel primitive equation model. *Mon. Wea. Rev.*, **112**, 1831-1842.
- Bates, J. R., F. H. M. Semazzi, R. W. Higgins und S. R. M. Barros, 1990:** Integration of the shallow-water equations on the sphere using a vector semi-Lagrangian scheme with a multigrid solver. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 1615-1627.
- Bermejo, R. und A. Staniforth, 1992:** The conversion of semi-Lagrangian advection schemes to quasi-monotone schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 2622-2632.
- Carpenter, R. L., Jr., K. K. Droegemeier, P. R. Woodward und C. E. Hane, 1990:** Application of the piecewise parabolic method to meteorological modeling. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 586-612.
- Colella, P. und P. R. Woodward, 1984:** The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *J. Comput. Phys.*, **54**, 174-201.
- Cote, J., 1988:** A Lagrange multiplier approach for the metric terms of semi-Lagrangian models on the sphere. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **114**, 1347-1352.
- Cote, J. und A. Staniforth, 1988:** A two-time-level semi-Lagrangian semi-implicit scheme for spectral models. *Mon. Wea. Rev.*, **116**, 2003-2012.
- Courant, R., K. O. Friedrichs und H. Lewy, 1928:** Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. *Math. Annalen*, **100**, 32-74.
- Eliassen, E., B. Machenhauer und E. Rasmussen, 1970:** On a numerical method for integration of the hydrodynamical equations with a spectral representation of the horizontal fields. *Rept. No. 2*, Institut for Teoretisk Meteorologi, Kobenhavns Universitet, Denmark, 35 pp.
- Fjortoft, R., 1952:** On a numerical method of integrating the barotropic vorticity equation. *Tellus*, **4**, 179-194.

- Gravel, S. und A. Staniforth, 1994:** A mass-conserving semi-Lagrangian scheme for the shallow-water equations. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 243-248.
- Hirt, C. W., A. A. Amsden und J. L. Cook, 1974:** An arbitrary Lagrangian-Eulerian Computing Method for all Flow Speeds. *J. Comput. Phys.*, **14**, 227-253.
- Holm, E. V., 1995:** A fully two-dimensional, nonoscillatory advection scheme for momentum and scalar transport equations. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 536-552.
- Jarraud, M. und C. Girard, 1984:** An extensive quasi-operational comparison between a spectral and a grid point model. *ECMWF Seminar 1983, Volume 2*, 1-59.
- Krishnamurti, T. N., 1962:** Numerical integration of primitive equations by a quasi-Lagrangian advective scheme. *J. Appl. Meteor.*, **1**, 508-521.
- Kwizak, M. und A. J. Robert, 1971:** A semi-implicit scheme for grid point atmospheric models of the primitive equations. *Mon. Wea. Rev.*, **99**, 32-36.
- Laprise, J. P. R., 1988:** Mass correction in a spectral GCM. WCRP numerical experimentation program; Research activities in atmospheric and oceanic modeling, Rep. No. **8**, WMO/TD-No. 63, 3.12-3.13.
- Laprise, J. P. R. und A. Plante, 1995:** A class of semi-Lagrangian integrated-mass numerical transport algorithms. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 553-565.
- Leith, C. E., 1965:** Lagrangian advection in an atmospheric model. Tech. Note No. **66**, World Meteorological Organisation, Geneva, 168-176.
- Leonard, B. P., 1994:** Note on the von Neumann stability of explicit one-dimensional advection schemes. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **118**, 29-46.
- Leonard, B. P., A. P. Lock und M. K. MacVean, 1996:** Conservative explicit unrestricted-time-step multidimensional constancy-preserving advection schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2588-2606.
- Leslie, L. M. und R. J. Purser, 1991:** High-order numerics in a three-dimensional time-split semi-Lagrangian forecast model. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 1612-1623.
- Leslie, L. M. und R. J. Purser, 1995:** Three-dimensional mass-conserving semi-Lagrangian scheme employing forward trajectories. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 2551-2566.
- LeVeque, R. J., 1985:** A large time step generalization of Godunov's method for systems of conservation laws. *SIAM J. Num. Anal.*, **22**, 1051-1073.

- Lin, S.-J., W. C. Chao, Y. C. Sud und G. K. Walker, 1994:** A class of the van Leer-type transport schemes and its applications to the moisture transport in a general circulation model. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 1575-1593.
- Lin, S.-J. und R. B. Rood, 1996:** Multidimensional flux-form semi-Lagrangian transport schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2046-2070.
- Machenhauer, B., 1994:** A note on a mass-, energy- and entropy conserving semi-Lagrangian and explicit integration scheme for the primitive meteorological equations. MPI workshop on semi-Lagrangian methods, Hamburg 8-9 Oct. 1992. *MPI Report*, **146**, 73-102.
- Machenhauer, B. und M. Olk, 1996:** On the development of a cell-integrated semi-Lagrangian shallow water model on the sphere. ECMWF workshop on Semi-Lagrangian methods, 6-8 Nov. 1995. Workshop Proceedings, 213-228.
- Machenhauer, B. und M. Olk, 1997:** The implementation of the semi-implicit scheme in cell-integrated semi-Lagrangian models. The Andre J. Robert Memorial Volume. Numerical methods in Atmospheric and Oceanic Modeling. **XXXV**, No. 1, pp. 103-126.
- Machenhauer, B. und M. Olk, 1998:** Design of a Semi-Implicit Cell-Integrated Semi-Lagrangian Model. MPI workshop on conservative transport schemes, Hamburg 2-3 July 1998. *MPI Report*, **265**, 76-85.
- McDonald, A., 1984:** Accuracy of multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **112**, 1267-1275.
- McDonald, A., 1986:** A semi-Lagrangian and semi-implicit two-time-level integration scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 824-830.
- McDonald, A., 1987:** Accuracy of multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes II. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 1446-1450.
- McDonald, A. und J. R. Bates, 1987:** Improving the estimate of the departure point position in a two-time-level semi-Lagrangian and semi-implicit model. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 737-739.
- McDonald, A. und J. R. Bates, 1989:** Semi-Lagrangian integration of a gridpoint shallow-water model on the sphere. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 130-137.
- Moorthi, S., R. W. Higgins und J. R. Bates, 1995:** A global multilevel atmospheric model using a vector semi-Lagrangian finite difference scheme. Part 2, Version with physics. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 1523-1541.

- Orszag, S. A., 1970:** Transform method for the calculation of vector-coupled sums: Application to the spectral form of the vorticity equation. *J. Atmos. Sci.*, **27**, 890-895.
- Plante, A., 1993:** Transport de substances par schemas numeriques semi-lagrangiens integres par cellules. *M. S. thesis*, Physics Department, University of Quebec at Montreal, 127pp.
- Plumb, R. A., D. W. Waugh, R. J. Atkinson, P. A. Newman, L. R. Lait, M. R. Schoeberl, E. V. Browell, A. J. Simmons and M. Loewenstein, 1994:** Intrusions into the lower stratospheric Arctic vortex during the winter of 1991-1992. *J. Geophys. Res.*, **99**, 1089-1105.
- Prather, M. J., 1986:** Numerical advection by conservation of second-order moments. *J. Geophys. Res.*, **91**, 6671-6681.
- Priestly, A., 1993:** A quasi-conservative version of the semi-Lagrangian advection scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 621-629.
- Pudykiewicz, J. and A. Staniforth, 1984:** Some properties and comparative performance of the semi-Lagrangian method of Robert in the solution of the advection-diffusion equation. *Atmos. Ocean*, **22**, 283-308.
- Purnell, D. K., 1976:** Solution of the advective equation by upstream interpolation with a cubic spline. *Mon. Wea. Rev.*, **104**, 42-48.
- Purser, R. J., and L. M. Leslie, 1988:** A semi-implicit semi-Lagrangian finite-difference scheme using high order spatial differencing on a nonstaggered grid. *Mon. Wea. Rev.*, **116**, 2069-2080.
- Purser, R. J., and L. M. Leslie, 1991:** An efficient interpolation procedure for high-order three-dimensional semi-Lagrangian models. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 2492-2498.
- Purser, R. J., and L. M. Leslie, 1994:** An efficient semi-Lagrangian scheme using third-order semi-implicit time integration and forward trajectories. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 745-756.
- Rancic, M., 1992:** Semi-Lagrangian piecewise biparabolic scheme for two-dimensional horizontal advection of a passive scalar. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 1394-1406.
- Rancic, M., 1995:** An efficient, conservative, monotonic remapping for semi-Lagrangian transport algorithms. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 1213-1217.
- Rasch, P., 1994:** Conservative shape-preserving two-dimensional transport on a spherical reduced grid. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 1337-1350.

- Rasch, P. und M. Lawrence, 1998:** Recent development in transport methods at NCAR. MPI workshop on conservative transport schemes, Hamburg 2-3 July 1998. *MPI Report*, **265**, 65-75.
- Rasch, P. und D. Williamson, 1990a:** Computational aspects of moisture transport in global models of the atmosphere. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **116**, 1071-1090.
- Rasch, P. und D. Williamson, 1990b:** On shape-preserving interpolation and semi-Lagrangian transport. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **11**, 656-687.
- Ritchie, H., 1986:** Eliminating the interpolation associated with the semi-Lagrangian scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 135-146.
- Ritchie, H., 1987:** Semi-Lagrangian advection on a Gaussian grid. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 608-619.
- Ritchie, H., 1988:** Application of the semi-Lagrangian method to a spectral model of the shallow-water equations. *Mon. Wea. Rev.*, **116**, 1587-1598.
- Ritchie, H., 1991:** Application of the semi-Lagrangian method to a multilevel spectral primitive-equations model. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **117**, 91-106.
- Ritchie, H., 1994:** Examples of semi-Lagrangian advection alternatives. MPI workshop on semi-Lagrangian methods, Hamburg 8-9 Oct. 1992. *MPI Report*, **146**, 7-34.
- Roache, P. J., 1992:** A flux-based modified method of characteristics. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **15**, 1259-1275.
- Robert, A., 1981:** A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmos. Ocean*, **19**, 35-46.
- Robert, A., 1982:** A semi-Lagrangian and semi-implicit numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Jpn. Meteor. Soc.*, **60**, 319-325.
- Robert, A., T. L. Yee und H. Ritchie, 1985:** A semi-Lagrangian and semi-implicit numerical integration scheme for multilevel atmospheric models. *Mon. Wea. Rev.*, **113**, 388-394.
- Rood, R. B., 1987:** Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models. *Rev. Geophys.*, **25**, 71-100.
- Sawyer, J. S., 1963:** A semi-Lagrangian method of solving the vorticity advection equation. *Tellus*, **15**, 336-342.
- Smolarkiewicz, P. K., 1984:** A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion. *J. Comput. Phys.*, **54**, 325-362.

- Smolarkiewicz, P. K. und P. J. Rasch, 1991:** Monotone advection on the sphere: An eulerian versus semi-Lagrangian approach. *J. Atmos. Sci.*, **48**, 793-810.
- Smolarkiewicz, P. K. und J. A. Pudykiewicz, 1992:** A class of semi-Lagrangian approximations for fluids. *J. Atmos. Sci.*, **49**, 2082-2096.
- Staniforth, A. und J. Cote, 1991:** Semi-Lagrangian integration schemes for atmospheric models - a review. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 2206-2223.
- Staniforth, A. und J. Pudykiewicz, 1985:** Reply to comments on and addenda to "Some properties and comparative performance of the semi-Lagrangian method of Robert in the solution of the advection-diffusion equation." *Atmos. Ocean*, **23**, 195-200.
- Takacs, L. L., 1985:** A two step scheme for the advection equation with minimized dissipation and dispersion errors. *Mon. Wea. Rev.*, **113**, 1050-1065.
- Tanguay, M., A. Simard und A. Staniforth, 1989:** A three-dimensional semi-Lagrangian scheme for the Canadian regional finite-element forecast model. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1861-1871.
- Temperton, C. und A. Staniforth, 1987:** An efficient two-time-level semi-Lagrangian semi-implicit integration scheme. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **113**, 1025-1039.
- Thuburn, J., 1996:** Multidimensional flux-limited advection schemes. *J. Comput. Phys.*, **123**, 74-83.
- van Leer, B., 1974:** Towards the ultimate conservative difference scheme. Part II: Monotonicity and conservation combined in a second order scheme. *J. Comput. Phys.*, **14**, 361-370.
- van Leer, B., 1977:** Towards the ultimate conservative difference scheme. Part IV: A new approach to numerical convection. *J. Comput. Phys.*, **23**, 276-299.
- van Leer, B., 1979:** Towards the ultimate conservative difference scheme. Part V: A second order sequel to Godunov's Method. *J. Comput. Phys.*, **32**, 101-136.
- Wiin-Nielsen, A., 1959:** On the application of trajectory methods in numerical forecasting. *Tellus*, **11**, 180-196.
- Williamson, D. L., 1990:** Semi-Lagrangian transport in the NMC spectral model. *Tellus*, **42A**, 413-428.
- Williamson, D. L., J. B. Drake, J. J. Hack, R. Jakob und P. N. Swarztrauber, 1992:** A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry. *J. Comput. Phys.*, **102**, 211-224.

- Williamson, D. L., J. T. Kiehl, V. Ramanathan, R. E. Dickinson und J. J. Hack, 1987:**  
Description of NCAR Community Climate Model (CCM1). *NCAR Tech. Note, NCAR/*  
*TN - 285 + STR*, National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado.
- Williamson, D. und P. Rasch, 1989:** Two-dimensional semi-Lagrangian transport with  
shape-preserving interpolation. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 102-129.
- Zalesak, S. T., 1979:** Fully multidimensional flux-corrected-transport algorithms for fluids.  
*J. Comput. Phys.*, **31**, 335-362.

