

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK,
WIRTSCHAFT UND KULTUR (FH)
LEIPZIG

Fakultät für Informatik, Mathematik und Naturwissenschaften



DIPLOMARBEIT

von

Carsten Niebuhr

**Verfahren höherer Ordnung zur
numerischen Lösung der Advektionsgleichung
auf ungleichmäßigen Gittern**

Studiengang:

Wirtschaftsmathematik

Betreuer:

Prof. Bernd Engelmann (HTWK Leipzig)

Betreuer:

Dr. Oswald Knoth (Leibniz-Institut für Troposphärenforschung)

Abgabe:

07. Dezember 2009

Abstract

This diploma thesis deals with the choice of qualified numerical higher order schemes, which allow a stable integration of the linear advection equation on irregular grids with "large" time steps. At first basic principles of spatial and temporal discretisations for general grids are discussed. To temporal discretisation are introduced at first explicit Runge-Kutta methods.

In the further process another spatial discretisation on the basis of a logarithmic ansatz function as well as other limiting techniques are presented.

Furthermore linear-implicit time integration methods are discussed, which permit larger time steps in the vicinity of small grid cells. Particularly a new Rosenbrock W-Method is constructed, whose basic explicit Runge-Kutta method already shows good stability properties. These W-Methods additionally allows the use of a "partial" Jacobian matrix, which is calculated only in the neighbourhood of small grid cells.

Finally, it is shown like the new spatial discretisation in combination with the linear-implicit Rosenbrock W-Method in the numerical solution of the two-dimensional compressible Euler equations can be used. For a variety of well-chosen test cases the numerical solutions are improved significantly in terms of local extrema and symmetry.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Motivation	3
1.2	Advektionsgleichung	5
2	Numerische Lösung der linearen Advektionsgleichung	6
2.1	Ortsdiskretisierung mittels finiter Volumen	6
2.1.1	Linienmethode	7
2.1.2	Ortsdiskretisierung und Positivität	14
2.1.3	Slope-Limitierung	15
2.2	Explizite Zeitintegrationsverfahren	19
2.2.1	Explizite Runge-Kutta Verfahren	19
2.2.2	Ordnungsbedingungen	21
2.3	Volldiskretisierung	22
2.3.1	CFL-Bedingung	22
2.3.2	Gegenüberstellung der Diskretisierungen	24
3	Logarithmische Limiter	28
3.1	Logarithmische Rekonstruktion	28
3.2	”Logarithmischer” Limiter	33
3.3	Vergleich der Limiter	38
4	Implizite Zeitintegrationsverfahren	43
4.1	Rosenbrock Verfahren	43
4.2	Rosenbrock W-Verfahren	47
4.3	RosRK3 Verfahren	48
4.4	Numerische Tests	52
4.4.1	Verhalten der Verfahren auf un-/gleichmäßigen Gittern	53
4.4.2	Partiell-implizite Verfahren	56
5	ASAM	60
5.1	Implementierung	61
5.2	Numerische Tests	62
6	Zusammenfassung	67
A	Abkürzungsverzeichnis	69

B Mathematica-Code	71
C Abbildungsverzeichnis	74
D Tabellenverzeichnis	76
E Literaturverzeichnis	77

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Der Einfluss von Menschen verursachten Emissionen auf die Luftqualität und die globale Erwärmung ist ein Bereich der Forschung, der in den letzten Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen hat. Insbesondere die Interaktion zwischen Aerosolpartikeln, Entwicklung von Wolken und Klima ist ein Bereich, indem aktuell intensiv Forschung betrieben wird.

Moderne Luftverschmutzungs- und Strömungsmodelle können benutzt werden, um die Entwicklung der Konzentrationen von Schadstoffen in der Atmosphäre zu untersuchen. Die relevanten Prozesse dieser Modelle können durch partielle Differentialgleichungen (PDE) beschrieben und unter Verwendung numerischer Verfahren gelöst werden. Durch entsprechende Visualisierung der numerischen Ergebnisse kann mit Hilfe dieser Modelle ein virtuelles Abbild der Realität geschaffen werden. Derartige Modelle ermöglichen beliebige Eingabedaten zu verändern und somit deren Einfluss auf die Modellergebnisse zu beobachten. Bei guter Parametrisierung des Modells an bestehende Verhältnisse können Vorhersagen getroffen werden, die von hohem wirtschaftlichen und wissenschaftlichen Interesse sein können.

Die numerische Simulation von Strömungen findet vielfältige Anwendungsmöglichkeiten. Erwähnt seien aerodynamische Untersuchungen in der Automobilindustrie, Strömungsvorgänge in chemischen Anlagen sowie Untersuchungen zur Schallerzeugung und -ausbreitung. Eines der ersten und ältesten Einsatzgebiete, das auch von großem Allgemeininteresse geprägt ist, ist die Simulation und Vorhersage des lokalen und globalen Wetters.

Ein Grundbaustein der zur Beschreibung verwendeten PDE ist die lineare Advektionsgleichung. Deren numerische Lösung ist auch gegenwärtig ein wichtiger Forschungsschwer-

punkt. Gegenstand der Untersuchungen ist die Konstruktion von numerischen Verfahren mit hoher Ordnung in Raum und Zeit, welche gleichzeitig die Eigenschaften der exakten Lösung wie Positivität und Massenerhaltung gewährleisten.

Das Ziel dieser Diplomarbeit ist die Auswahl geeigneter numerischer Verfahren, welche eine stabile Integration der linearen Advektionsgleichung auf ungleichmäßigen Gittern mit "großen" Zeitschritten ermöglicht. Ungleichmäßige Gitter treten unter anderem bei lokaler Ortsverfeinerung, sphärischen Gittern sowie der Berücksichtigung von Hindernissen durch Einbettung in kartesische Gitter auf. Die meisten Untersuchungen beziehen sich dabei auf die eindimensionale Advektionsgleichung mit periodischen Randbedingungen.

Zunächst wird die zu betrachtende lineare Advektionsgleichung vorgestellt. Das Kapitel 2 ist der numerischen Lösung der linearen Advektionsgleichung mittels Linienmethode gewidmet. Grundlegende Prinzipien von örtlicher und zeitlicher Diskretisierung für diesen Typ von Gleichungen werden diskutiert. Die vorgestellten Ortsdiskretisierungen werden dabei für allgemeine Gitter beschrieben. Zur zeitlichen Diskretisierung werden zunächst explizite Runge-Kutta Verfahren benutzt.

In 3. Kapitel wird eine weitere Ortsdiskretisierung auf der Basis einer logarithmischen Ansatzfunktion vorgestellt. Mittels spezieller Limitierungsansätze werden deren Eigenschaften auch auf die in Kapitel 2 vorgestellten polynomialen Diskretisierungen übertragen. Auch hier werden alle Ableitungen für beliebige eindimensionale Gitter betrachtet.

In Kapitel 4 werden zusätzlich linear-implizite Zeitintegrationsverfahren eingeführt, welche gegenüber expliziten Zeitintegrationsverfahren auch bei Vorhandensein einzelner kleiner Gitterzellen größere Zeitschritte erlauben. Insbesondere wird ein neues Rosenbrock W-Verfahren konstruiert, deren zugrunde liegendes explizites Runge-Kutta Verfahren bereits ein gutes Stabilitätsverhalten aufweist. Diese W-Verfahren erlauben zusätzlich die Nutzung einer "partiellen" Jacobi-Matrix, welche nur in der Umgebung von kleinen Gitterzellen berechnet wird.

Im abschließenden Kapitel 5 wird gezeigt wie die neue Ortsdiskretisierung in Kombination mit den linear-impliziten Rosenbrock W-Verfahren bei der numerischen Lösung der zweidimensionalen kompressiblen Euler-Gleichungen genutzt werden können. Dies erfolgt mit dem vom Leibniz-Institut für Troposphärenforschung entwickelten Simulationsmodell ASAM. Es zeigt sich, dass für ausgewählte Testbeispiele die numerischen Lösungen in Bezug auf lokale Extrema und Symmetrie verbessert werden.

1.2 Advektionsgleichung

Die lineare Advektionsgleichung oder auch Einweg-Wellengleichung ist eine hyperbolische PDE erster Ordnung. Die lineare Advektionsgleichung ist ein Spezialfall der allgemeinen PDE erster Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t}c(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}f(x, t, c(x, t)) = 0, \quad (1.1)$$

$$\text{mit } f(x, t, c(x, t)) = u(x, t)c(x, t), \quad (1.2)$$

hierbei stellt $c(x, t)$ eine zu ermittelnde Konzentration dar, welche sich mit der Geschwindigkeit $u(x, t)$ bewegt. Alle abhängigen Variable sind, sofern nicht anders vermerkt, Funktionen vom Ort x und der Zeit t . In der weiteren Notation wird die explizite Abhängigkeit von x und t weggelassen. Gleichung (1.1) lautet somit:

$$\frac{\partial}{\partial t}c + \frac{\partial}{\partial x}f(c) = 0, \quad (1.3)$$

$$\text{mit } f(c) = uc. \quad (1.4)$$

Die Advektionsgleichung wird über dem Intervall $x \in [0, 1]$ mit periodischen Randbedingungen $c(0, t) = c(1, t)$ und Anfangsbedingungen $c(x, 0) = c_0(x)$ betrachtet. Weiterhin setzen wir voraus, dass $u(x, t)$ nicht vom Ort und Zeit abhängt und wenn nicht anders vermerkt, nicht negativ ist.

Im Zusammenhang mit der Modellierung von Schadstoffen bildet $c(x, t)$ die Konzentration eines Luftbestandteils (z.B. Ozon, CO_2) dar. Anstelle der Konzentration wird dann häufig das Mischungsverhältnis $\mu = c/\rho$ mit $\rho =$ Dichte der Luft verwendet. Die Gleichung (1.3) lautet dann:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mu) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\mu) = 0. \quad (1.5)$$

Man beachte, dass für $\mu \equiv 1$ sich Gleichung (1.5) auf die eindimensionale Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0.$$

reduziert. Im Falle $u(x, t) = \textit{konst.}$ lautet die exakte Lösung der eindimensionalen Advektionsgleichung (1.3):

$$c(x, t) = c_0(x - ut).$$

Die Lösung zum Zeitpunkt t am Ort x ist also gleich dem Anfangswert an der Stelle $x - ut$, bzw. das Anfangsprofil hat sich im Falle $u > 0$ um die Strecke ut nach rechts bewegt.

Kapitel 2

Numerische Lösung der linearen Advektionsgleichung

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird auf die Diskretisierung im Ort der PDE (1.3) eingegangen. In diesem Zusammenhang wird die Finite Volumen Methode, sowie das Slope-Limiting diskutiert. Im anschließenden Abschnitt werden zur Bestimmung einer approximativen Näherungslösung der bereits im Ort diskretisierten Advektionsgleichung diskrete Zeitintegrationsverfahren eingeführt. Schließlich werden die Ortsdiskretisierung und die Zeitintegrationsverfahren zu einem voll diskretisierten Verfahren kombiniert.

2.1 Ortsdiskretisierung mittels finiter Volumen

Die meist verwendeten Methoden zur numerischen Approximation im Bereich der Strömungsdynamik sind:

- Finite Differenzen Methode (FDM)
- Finite Elemente Methode (FEM)
- Finite Volumen Methode (FVM)

All diese Methoden erfordern eine Diskretisierung des Untersuchungsgebietes im Ort in Form von Berechnungsknoten, Elementen oder Volumen. Die gesuchte Funktion c wird dann an den Berechnungsknoten, den Ecken der Elemente oder in den Volumen approximiert. Aus den diskretisierten Werten kann c durch geeignete Interpolationspolynome an einer beliebigen Stelle rekonstruiert werden.

2.1.1 Linienmethode

Die Linienmethode (MOL) ist eine Methode zur numerischen Integration von PDEs. Die Idee der Linienmethode für PDEs besteht darin, zuerst eine Diskretisierung hinsichtlich der räumlichen Variablen und danach das resultierende Problem hinsichtlich der Zeit zu diskretisieren. Dabei wird im ersten Schritt die PDE in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen in der Zeit überführt.

Diese Vorgehensweise der MOL wird auch vertikale MOL genannt und umfasst im wesentlichen drei Schritte:

- Gebietszerlegung des Raumes x
- Ortsdiskretisierung bspw. über finite Volumen
- Lösen des resultierenden Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen.

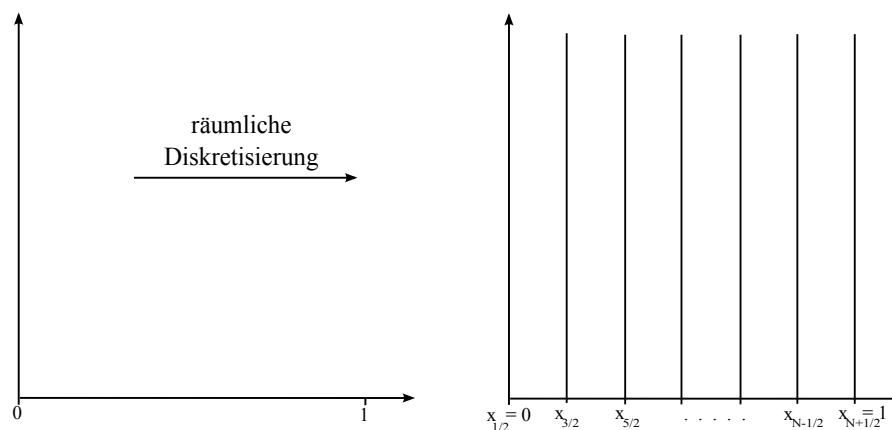


Abbildung 2.1: Linienmethode im 1D-Ortsgitter.

Dieser Methode steht die horizontale MOL gegenüber. Die Idee der horizontalen MOL besteht darin, zuerst eine Diskretisierung hinsichtlich der Zeit vorzunehmen, um somit das Problem direkt als ein Anfangswertproblem im Raum der ortsabhängigen Funktionen zu formulieren. Diese Vorgehensweise wird in dieser Diplomarbeit jedoch nicht weiter verfolgt.

Schritt 1: Gebietszerlegung im Ort

Das Intervall $[0, 1]$ das über der Gleichung (1.3) gelöst werden soll, wird in N disjunkte finite Volumen $\Omega_j = [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ zerlegt, mit $j = 1, \dots, N$. Diese Volumina sollen dabei das Intervall vollständig überdecken (siehe Abb. 2.1), mit $x_{\frac{1}{2}} = 0$ und $x_{N+\frac{1}{2}} = 1$.

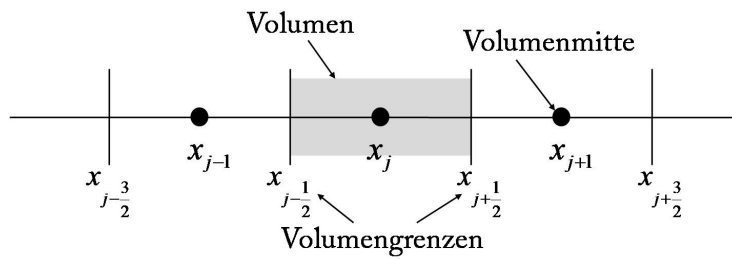


Abbildung 2.2: Gebietszerlegung im Detail

Die Grenzen $x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}$ des Volumens Ω_j werden im weiteren als Interface-Stellen bezeichnet. Zudem bezeichnen wir mit

$$h_j = x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}$$

die Ortsschrittweite bzw. Zellengröße und

$$x_j = \frac{x_{j-\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{1}{2}}}{2}$$

den Zellenmittelpunkt. Vergleiche dazu Abbildung 2.2.

Schritt 2: Diskretisierung

Zur Ortsdiskretisierung mittels finiter Volumen wird Gleichung (1.3) über das Volumen Ω_j integriert. Es folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} c = -\frac{\partial}{\partial x} f(c) \quad \Bigg/ \int_{\Omega_j} dx$$

Unter der Annahme das die Differentiation in der Zeit und die Integration im Raum vertauschbar sind folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_j} c \, dx = - \int_{\Omega_j} \frac{\partial}{\partial x} f(c) \, dx.$$

Unter Verwendung der Bezeichnung

$$w_j(t) = \frac{1}{h_j} \int_{\Omega_j} c(x, t) \, dx$$

ergibt sich nun:

$$w_j'(t) = -\frac{1}{h_j} \int_{\Omega_j} \frac{\partial}{\partial x} f(c) \, dx. \quad (2.1)$$

Die $w_j(t)$ werden zu einem Vektor w zusammengefasst, wobei jedes Element von w nun den durchschnittlichen Wert von c im jeweiligen Volumen zum Zeitpunkt t beschreibt. Nach dem Satz von Stokes wird die rechte Seite von (2.1) umgeformt. Aus der partiellen Integration folgt schließlich die semi-diskrete Flussform

$$w'_j(t) = -\frac{1}{h_j} \left(f_{j+\frac{1}{2}} \left(t, c(x_{j+\frac{1}{2}}, t) \right) - f_{j-\frac{1}{2}} \left(t, c(x_{j-\frac{1}{2}}, t) \right) \right), \quad (2.2)$$

mit den Flüssen $f_{j+\frac{1}{2}}$ an den Volumengrenzen $x_{j+\frac{1}{2}}$. Die Flussform (2.2) kann interpretiert werden als die zeitliche Entwicklung w'_j mit der Differenz von einfließenden und ausfließenden Flüssen $f_{j-\frac{1}{2}}, f_{j+\frac{1}{2}}$ dividiert durch die Ortsschrittweite h_j . Für den Fall der linearen Advektionsgleichung (1.4) reduziert sich der Fluss zu

$$f_{j+\frac{1}{2}} = uw_{j+\frac{1}{2}}$$

mit den unbekanntem Interface-Werten $w_{j+\frac{1}{2}}(t)$, welche aus den angrenzenden Mittelwerten w_j bestimmt werden müssen.

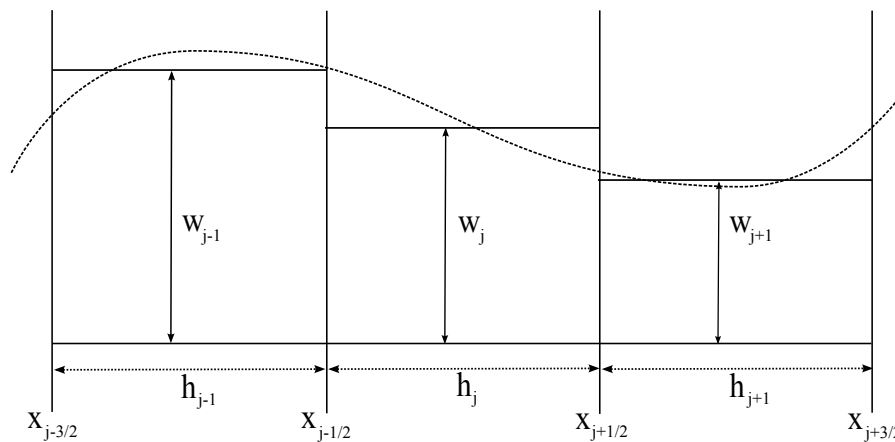


Abbildung 2.3: Diskretisierung im Ort

Die Bestimmung des Interface-Wertes $w_{j+\frac{1}{2}}(t)$ erfolgt durch eine Rekonstruktionsfunktion φ mit

$$w_{j+\frac{1}{2}} = \varphi(\dots, w_{j-1}, w_j, w_{j+1}, \dots),$$

die von den rechts bzw. links angrenzenden Mittelwerten w_j abhängt. Die Menge der verwendeten Mittelwerte variiert je nach Ansatz und wird als Stencil der Rekonstruktion bezeichnet. Die Größe des Stencil bestimmt zusammen mit der Ansatzfunktion die Güte der Approximation. Diese hat Einfluss auf die Effizienz des Gesamtverfahrens.

Die Güte der Approximation wird durch die Ordnung des lokalen Fehlers

$$L(h) = w_{j+\frac{1}{2}} - c_{j+\frac{1}{2}}$$

bestimmt. Eine Approximation ist von der Ordnung p , falls

$$\|L(h)\| = \mathcal{O}(h^p).$$

Die Größe des lokalen Fehlers wiederum hängt vom Stencil des Rekonstruktionsansatzes ab.

Der einfachste Rekonstruktionsansatz benutzt als Stencil nur den Mittelwert w_j selbst. Für konstante Windgeschwindigkeiten $u \geq 0$ wird $w_{j+\frac{1}{2}}(t)$ nur durch w_j approximiert (siehe Abb. 2.4).

Dieser Rekonstruktionsansatz wird *first order upwind scheme* genannt ([12], Seite 52 ff).

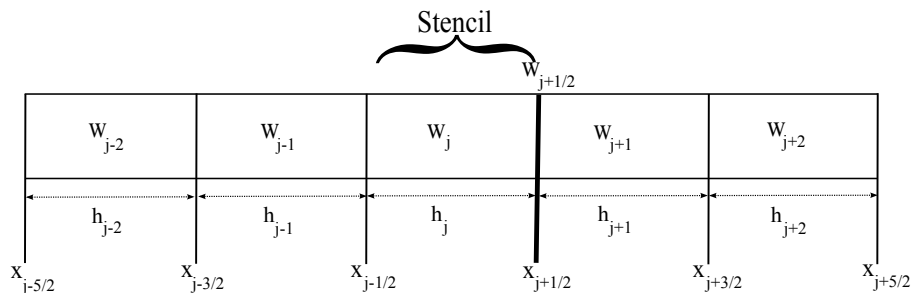


Abbildung 2.4: Stencil des Upwind-Verfahrens erster Ordnung.

Falls die konstante Windgeschwindigkeit $u < 0$ ist, so wird $w_{j+\frac{1}{2}}(t)$ über den Mittelwert w_{j+1} definiert.

$$w_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} w_j, & \text{falls } u \geq 0, \\ w_{j+1}, & \text{falls } u < 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Aus der Flussform (2.2) folgen somit die Verfahren erster Ordnung:

$$w'_j(t) = \begin{cases} -\frac{1}{h_j}(uw_j - uw_{j-1}), & \text{falls } u \geq 0, \\ -\frac{1}{h_j}(uw_{j+1} - uw_j), & \text{falls } u < 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Die Diskretisierung (2.4) können so interpretiert werden, dass ein Fluss, der eine Zelle verlässt, direkt proportional zur Konzentration in der Zelle ist.

Eine Eigenschaft dieses asymmetrischen Ansatzes (2.4) ist, dass die Approximation zwischen den unterschiedlichen Vorzeichen des Windvektors u unterscheidet, so dass die Ortsdiskretisierung symmetrisch im folgenden Sinne ist

$$f_{j+\frac{1}{2}}(u, (\dots, w_{j-1}, w_j, w_{j+1}, \dots)) = f_{j+\frac{1}{2}}(-u, (\dots, w_{j+1}, w_j, w_{j-1}, \dots)).$$

Durch Interpolation, unter Berücksichtigung von Mittelwerten benachbarter Zellen, können Ansätze höherer Ordnung konstruiert werden. Zwei weitere Interpolationen sollen hier vorgestellt werden. Das *second order central scheme* und das *third order upwind scheme*.

Für eine lineare Ansatzfunktion

$$q(\xi) = a_0 + a_1\xi$$

werden die Parameter a_0 und a_1 aus den folgenden beiden Interpolationsbedingungen ermittelt.

$$\begin{aligned} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} (a_0 + a_1(\xi)) \, d\xi &= w_j h_j, \\ \int_{x_{j+\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{3}{2}}} (a_0 + a_1(\xi)) \, d\xi &= w_{j+1} h_{j+1}. \end{aligned}$$

Man beachte das die Interpolationsbedingungen Volumen gemittelt erfolgen. Durch bestimmen der Koeffizienten a_0 und a_1 liefert die Ansatzfunktion als Ergebnis

$$q(\xi) = \frac{w_j \left(x_{j+\frac{3}{2}} + x_{j+\frac{1}{2}} \right) - w_{j+1} \left(x_{j+\frac{1}{2}} + x_{j-\frac{1}{2}} \right)}{h_j + h_{j+1}} + \frac{2\xi (w_{j+1} - w_j)}{h_j + h_{j+1}}$$

und für den Wert am Zell-Interface ergibt sich:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = q \left(x_{j+\frac{1}{2}} \right) = \frac{h_{j+1} w_j + h_j w_{j+1}}{h_j + h_{j+1}}. \quad (2.5)$$

Diese Approximation wird als *second order central scheme* bezeichnet. Eine Unterscheidung des Vorzeichen von u ist hier nicht notwendig, da bei $u \geq 0$ und $u < 0$ der gleiche Rekonstruktionsansatz verwendet wird. Der Stencil dieses Ansatzes umfasst zwei Mittelwerte (w_j, w_{j+1}) um den Zell-Interface (siehe Abb. 2.5).

Eine noch bessere Approximation kann durch Polynome höherer Ordnung erzielt wer-

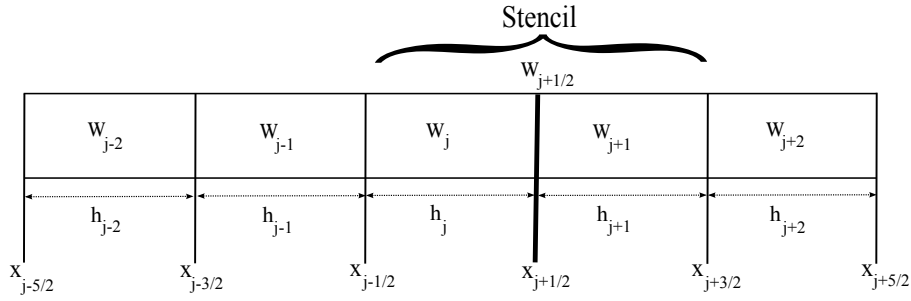


Abbildung 2.5: Stencil des Central-Verfahrens zweiter Ordnung.

den. Bei Wahl eines quadratischen Polynoms p als Interpolanten

$$p(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2$$

werden die Interpolationsbedingungen:

$$\forall k \in \{j-1, j, j+1\} : \int_{x_{k-\frac{1}{2}}}^{x_{k+\frac{1}{2}}} p(\xi) d\xi = w_k h_k$$

verwendet oder integriert in den Grenzen:

$$\begin{aligned} \left[a_0\xi + \frac{a_1}{2}\xi^2 + \frac{a_2}{3}\xi^3 \right]_{x_{j-\frac{3}{2}}}^{x_{j-\frac{1}{2}}} &= w_{j-1}h_{j-1}, \\ \left[a_0\xi + \frac{a_1}{2}\xi^2 + \frac{a_2}{3}\xi^3 \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} &= w_j h_j, \\ \left[a_0\xi + \frac{a_1}{2}\xi^2 + \frac{a_2}{3}\xi^3 \right]_{x_{j+\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{3}{2}}} &= w_{j+1}h_{j+1}. \end{aligned}$$

Durch einsetzen der Volumengrenzen ergibt sich das Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} a_0 h_{j-1} + \frac{a_1}{2} h_{j-1} \left(x_{j-\frac{3}{2}} + x_{j-\frac{1}{2}} \right) + \frac{a_2}{3} h_{j-1} \left(x_{j-\frac{3}{2}} + x_{j-\frac{1}{2}} \right)^2 &= w_{j-1} h_{j-1}, \\ a_0 h_j + \frac{a_1}{2} h_j \left(x_{j-\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{1}{2}} \right) + \frac{a_2}{3} h_j \left(x_{j-\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{1}{2}} \right)^2 &= w_j h_j, \\ a_0 h_{j+1} + \frac{a_1}{2} h_{j+1} \left(x_{j+\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{3}{2}} \right) + \frac{a_2}{3} h_{j+1} \left(x_{j+\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{3}{2}} \right)^2 &= w_{j+1} h_{j+1}, \end{aligned}$$

aus welchem wiederum die Koeffizienten a_0 , a_1 und a_2 bestimmt werden können. Falls zur Berechnung von $w_{j+\frac{1}{2}}$ im Falle $u \geq 0$ der Stencil w_{j-1} , w_j und w_{j+1} genutzt wird, ergibt sich:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = p \left(x_{j+\frac{1}{2}} \right) = w_j + \alpha_j w_{j-1} + \beta_j w_j + \gamma_j w_{j+1}, \quad (2.6)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned}\alpha_j &= -\frac{h_j h_{j+1}}{(h_{j-1} + h_j)(h_{j-1} + h_j + h_{j+1})}, \\ \beta_j &= -\frac{h_j ((h_{j-1} + h_j)^2 - h_j h_{j+1} - h_{j+1}^2)}{(h_{j-1} + h_j)(h_j + h_{j+1})(h_{j-1} + h_j + h_{j+1})}, \\ \gamma_j &= \frac{h_j(h_{j-1} + h_j)}{(h_j + h_{j+1})(h_{j-1} + h_j + h_{j+1})}.\end{aligned}$$

Es werden also zwei Upwind-Mittelwerte w_{j-1} und w_j sowie ein Downwind-Mittelwert w_{j+1} verwendet. Diese Art der Interpolation wird daher auch als *third order upwind-biased scheme* ([12], Seite 59 ff) bezeichnet. (Abb. 2.6)

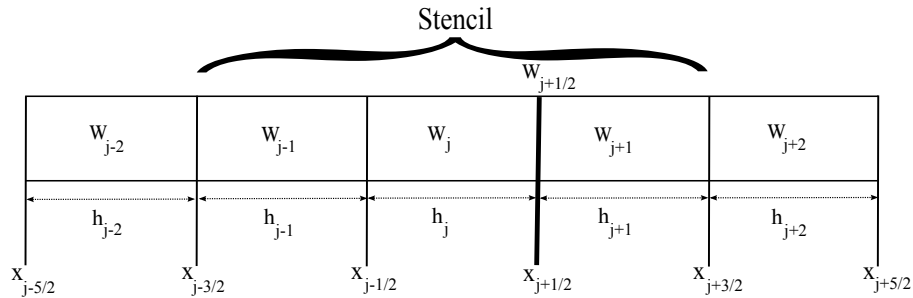


Abbildung 2.6: Stencil des Upwind-Verfahrens dritter Ordnung.

Für Windgeschwindigkeiten $u < 0$ wird der gespiegelte Stencil benutzt. Für die Rekonstruktion über finite Volumen gelten die Bedingungen

$$\forall k \in \{j, j+1, j+2\} : \int_{x_{k-\frac{1}{2}}}^{x_{k+\frac{1}{2}}} p(\xi) d\xi = w_k h_k.$$

Hier ergibt sich dann für $w_{j+\frac{1}{2}}$ mit dem entsprechenden Stencil:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = p\left(x_{j+\frac{1}{2}}\right) = w_{j+1} + \alpha_j w_j + \beta_j w_{j+1} + \gamma_j w_{j+2}$$

und den Koeffizienten

$$\begin{aligned}\alpha_j &= -\frac{h_{j+1} h_{j+2}}{(h_j + h_{j+1})(h_j + h_{j+1} + h_{j+2})}, \\ \beta_j &= -\frac{h_{j+1} ((h_j + h_{j+1})^2 - h_{j+1} h_{j+2} - h_{j+2}^2)}{(h_j + h_{j+1})(h_{j+1} + h_{j+2})(h_j + h_{j+1} + h_{j+2})}, \\ \gamma_j &= \frac{h_{j+1}(h_j + h_{j+1})}{(h_{j+1} + h_{j+2})(h_j + h_{j+1} + h_{j+2})}.\end{aligned}$$

Für gleichmäßige Gitter, $h_j \equiv h$, können die Rekonstruktionen (2.5) und (2.6) zu der so genannten κ -Familie zusammengefasst werden:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} w_j + \frac{1-\kappa}{4}(w_j - w_{j-1}) + \frac{1+\kappa}{4}(w_{j+1} - w_j), & \text{falls } u \geq 0 \\ w_{j+1} + \frac{1-\kappa}{4}(w_{j+1} - w_{j+2}) + \frac{1+\kappa}{4}(w_j - w_{j+1}), & \text{falls } u < 0. \end{cases} \quad (2.7)$$

Mit den Parametern $\kappa = 1$ und $\kappa = \frac{1}{3}$ ergeben sich die Ansätze (2.5) und (2.6). Die κ -Familie ist eine Ein-Parameter Familie für verschiedene Rekonstruktionsansätze und wurde von van Leer, ([12], S. 219) eingeführt. Neben den beiden obigen Ansätzen umfasst die κ -Familie weitere Rekonstruktionsansätze von (1.3) wie bspw. das *second order upwind scheme* für $\kappa = -1$. Weitere Rekonstruktionsansätze können durch die Benutzung von Polynomen höherer Ordnung hergeleitet werden, wobei die Größe des Stencils gleich dem Grad des Polynoms ist. Ebenso können nichtpolynomiale und nichtlineare Ansätze zur Rekonstruktion verwendet werden.

2.1.2 Ortsdiskretisierung und Positivität

Es gibt keine perfekte Ortsdiskretisierung, vielmehr ist jede Diskretisierung ein Kompromiss an die Approximationsordnung und die Monotonie (Positivität) der Lösung. Beispielsweise garantiert das Upwind-Verfahren erster Ordnung Positivität, jedoch ist das Verfahren sehr ungenau und diffusiv. Unter dem Begriff der Diffusion versteht man das starke dämpfen bzw. verschmieren des gegebenen Anfangsprofils. Schemata höherer Ordnung führen zwar zu einer besseren Genauigkeit und sind weniger diffusiv, jedoch garantieren sie keine Positivität.

Wie aus der exakten Lösung der eindimensionalen Advektionsgleichung ersichtlich ist, ist die Lösung positiv, falls das Anfangsprofil diese Eigenschaft (Positivität) besitzt. Ebenso ist das Volumenintegral über die Lösung für alle Zeitpunkte identisch (Masseerhaltung).

Es wäre wünschenswert, dass diese beiden Eigenschaften auch die im Ort diskretisierte Advektionsgleichung

$$w'(t) = F(w(t)) \quad (2.8)$$

besitzt. Hierbei heißt Positivität:

$$w(0) \geq 0 \quad \Rightarrow \quad w(t) \geq 0 \quad \forall t$$

und die Masseerhaltung:

$$\sum_j h_j w_j(t) = \text{const.}$$

Die Masseerhaltung ist dabei automatisch durch die Diskretisierung in der Flussform erfüllt:

$$\sum_j h_j w_j' = \sum_j f_{j-\frac{1}{2}} - \sum_j f_{j+\frac{1}{2}} = 0.$$

In Luftverschmutzungs- oder Strömungsmodellen würden negative $w_j(t)$ negative Konzentrationen entsprechen, welche physikalisch nicht sinnvoll wären.

Neben der Positivität wird auch oftmals gefordert, dass die totale Variation der diskretisierten Advektionsgleichung gedämpft wird (*total variation diminishing*, kurz TVD). D.h., die "Totale Variation", definiert durch

$$TV(t) = \sum_j |w_j(t) - w_{j-1}(t)|,$$

darf im Untersuchungszeitraum nicht wachsen

$$\forall t, \tau > 0 : TV(t + \tau) \leq TV(t).$$

Falls diese Bedingung erfüllt ist, bleibt zusätzlich die Monotonie der Lösung erhalten, was das oben erwähnte Problem der Schwingungen steiler Gradienten verhindert.

2.1.3 Slope-Limitierung

Um Oszillationen zu vermeiden und Positivität garantieren zu können gibt es mehrere Möglichkeiten. Eine Möglichkeit besteht darin den Fluss f zu limitieren. Dazu werden Rekonstruktionen höherer Ordnung als Korrektur, basierend auf den *first order upwind scheme*, formuliert.

Diese Vorgehensweise wird im weiteren für das κ -*scheme* beschrieben, dazu wird das Anstiegsverhältnis (*slope-ratio*)

$$\theta_{j+\frac{1}{2}} = \frac{w_{j+1} - w_j}{w_j + 1 - w_j},$$

dass ein Maß für die Krümmung von w an der Stelle $x_{j+\frac{1}{2}}$ ist, definiert (siehe Abb. 2.7). Sind die Mittelwerte monoton, so ist das Anstiegsverhältnis immer positiv und $\theta_{j+\frac{1}{2}} \approx 1$. An Extrema dagegen wird das Anstiegsverhältnis negativ:

$$w_{j-1} < w_j > w_{j+1} \vee w_{j-1} > w_j < w_{j+1} \Rightarrow \theta_{j+\frac{1}{2}} < 0.$$

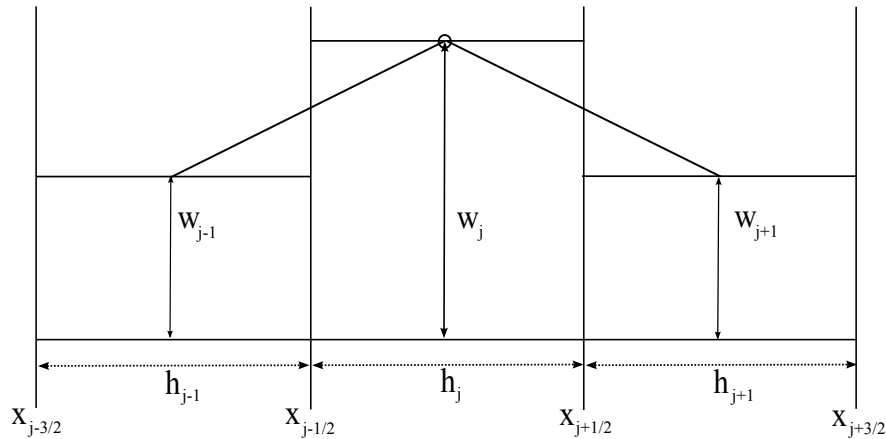


Abbildung 2.7: Steigungsrate

Das zuvor eingeführte κ -scheme (2.7) kann nun folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} w_j + \frac{1}{2}K(\theta_{j+\frac{1}{2}})(w_{j+1} - w_j) & \text{falls } u \geq 0, \\ w_{j+1} + \frac{1}{2}K(\theta_{j+\frac{1}{2}})(w_{j+2} - w_{j+1}) & \text{falls } u < 0, \end{cases} \quad (2.9)$$

mit

$$K(\theta) = \frac{1 - \kappa}{2}\theta + \frac{1 + \kappa}{2}.$$

$K(\theta_{j+\frac{1}{2}})$ wird durch eine beliebige Limiterfunktion $\phi_{j+\frac{1}{2}}(\theta)$ ersetzt, sodass für $u \geq 0$ folgende Gleichung gilt:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = w_j + \frac{1}{2}\phi_{j+\frac{1}{2}}(w_{j+1} - w_j). \quad (2.10)$$

Nach [11], Hundsdorfer u.a., ist eine positive Lösung von (2.8) garantiert, wenn die Limiterfunktion $\phi = \phi(r)$, für vorgegebenes $\delta > 0$, folgenden Bedingungen genügt:

$$\begin{aligned} \theta_{j+\frac{1}{2}} \leq 0 &\Rightarrow \phi_{j+\frac{1}{2}} = 0, \\ 0 &\leq \phi_{j+\frac{1}{2}} \leq \delta, \\ \phi_{j+\frac{1}{2}} &\leq 2\theta_{j+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Folglich ist das *first order upwind scheme* positiv, weil es gerade der Wahl $\phi_{j+\frac{1}{2}} \equiv 0$ entspricht.

In [24], Zvan u.a., werden Bedingungen hergeleitet, die für Ortsdiskretisierungen die TVD-Bedingung garantieren. Diese Bedingungen stimmen mit den obigen Bedingungen (2.11) über Positivität überein. Zudem führen die Autoren Bedingungen für das TVD-

Schema ein, deren Erfüllung die 2. Ordnung des Schemas garantiert:

$$\begin{aligned} \theta_{j+\frac{1}{2}} \leq \phi(\theta_{j+\frac{1}{2}}) &\leq \max \left\{ 2\theta_{j+\frac{1}{2}}, 1 \right\} && \text{falls } 0 \leq \theta_{j+\frac{1}{2}} \leq 1, \\ 1 \leq \phi(\theta_{j+\frac{1}{2}}) &\leq \max \left\{ \theta_{j+\frac{1}{2}}, 2 \right\} && \text{falls } \theta_{j+\frac{1}{2}} \geq 1. \end{aligned} \quad (2.12)$$

In Abb. 2.8 wurden die Bedingungen (2.11) und (2.12) grafisch dargestellt.

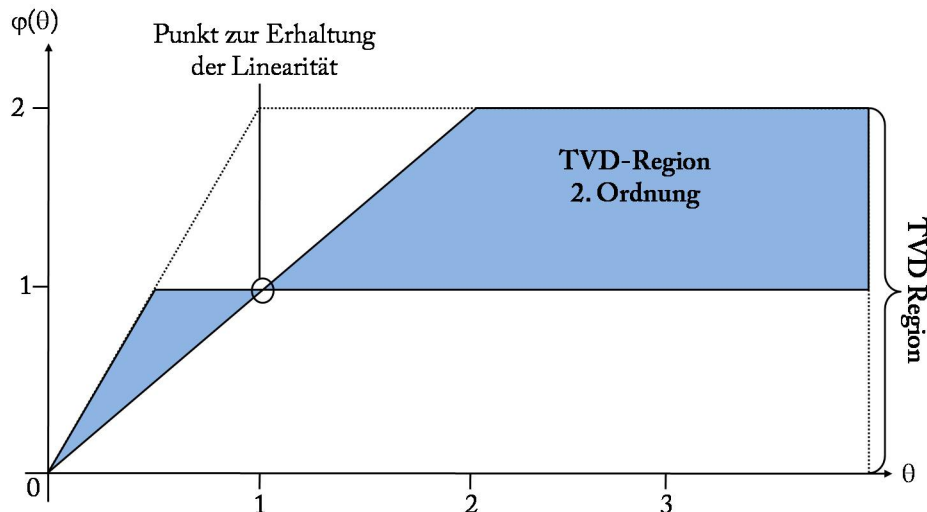


Abbildung 2.8: TVD Region für gleichmäßige Gitter

Gegeben sei der Limiter

$$\phi_{j+\frac{1}{2}} = \phi(\theta_{j+\frac{1}{2}}) := \max \left\{ 0, \min \left\{ 2\theta_{j+\frac{1}{2}}, \delta, K(\theta_{j+\frac{1}{2}}) \right\} \right\}, \quad (2.13)$$

so dass das Intervall in θ mit $\phi(\theta) = K(\theta)$ maximal ist. Dieser Limiter wird auch Limiter nach Koren genannt [10], [15]. Setzte man $\delta = 2$, so erhält man ein limitiertes *third order upwind-biased scheme* für die positive Advektion (2.10):

$$w_{j+\frac{1}{2}} = w_j + \frac{1}{2} \max \left\{ 0, \min \left\{ 2\theta_{j+\frac{1}{2}}, 2, \frac{2 + \theta_{j+\frac{1}{2}}}{3} \right\} \right\} (w_{j+1} - w_j).$$

Der Limiter (2.13) schaltet offenbar zwischen dem *first order upwind scheme* ($\phi(\theta) = 0$) und dem κ -*scheme* hin und her. Das κ -*Schema* wird, wann immer es möglich ist, angewandt. Für $\phi(\theta) = \theta$ wird das *second order central scheme* (2.5) und an Extremstellen das *first order upwind scheme* (2.3) ($\theta \leq 0 \Rightarrow \phi(\theta) = 0$) verwendet, damit die Lösung keine negativen Werte annimmt.

Im folgenden soll kurz auf die Konstruktion der Limiter auf ungleichmäßige Gitter eingegangen werden. In [2], Berger u.a., werden Bedingungen für Limiter auf ungleichmäßigen Gittern hergeleitet, um TVD zu erreichen. In der Limitierung müssen diese Bedingungen folgendermaßen aussehen:

$$\min \left\{ 2\theta_{j+\frac{1}{2}} \frac{h_j}{h_j + h_{j+1}}, \frac{h_j}{h_{j-1} + h_j} \right\} \leq \phi(\theta_{j+\frac{1}{2}}) \leq \min \left\{ 2, 2\theta_{j+\frac{1}{2}} \right\}. \quad (2.14)$$

Zusätzlich wird in Berger u.a. auch eine Bedingung zur Erhaltung der Linearität hergeleitet:

$$\phi \left(\frac{h_j + h_{j+1}}{h_{j-1} + h_j} \right) = \frac{2h_j}{h_{j-1} + h_j}. \quad (2.15)$$

Trifft diese Bedingung auf räumlich lineare w_j mit

$$\frac{w_j - w_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} = \frac{w_{j+1} - w_j}{x_{j+1} - x_j} \quad \forall j$$

so bleiben die w_j linear, wie die rekonstruierten Variablen $(x_{j+\frac{1}{2}}, w_{j+\frac{1}{2}})$ über der Interpolation von (x_j, w_j) und (x_{j+1}, w_{j+1}) .

Es kann gezeigt werden, dass durch Substitution des gleichmäßigen κ -scheme in ein variables Schema die Ergebnisse äquivalent zueinander sind und das letztere beide Bedingungen (2.14) und (2.15) erfüllt. Durch Transformation von (2.6) ergibt sich für die Limitierung auf ungleichmäßigen Gittern:

$$\begin{aligned} w_{j+\frac{1}{2}} &= w_j + \alpha_j w_{j-1} + \beta_j w_j + \gamma_j w_{j+1} \\ &= w_j - (w_j - w_{j-1})\alpha_j + (w_{j+1} - w_j)\gamma_j + w_j \underbrace{(\alpha_j + \beta_j + \gamma_j)}_{\equiv 0} \\ &= w_j + \left(\gamma_j - \alpha_j \frac{w_j - w_{j-1}}{w_{j+1} - w_j} \right) (w_{j+1} - w_j) \\ &= w_j + \left(\gamma_j - \alpha_j \theta_{j+\frac{1}{2}} \right) (w_{j+1} - w_j), \\ \Rightarrow \tilde{K}_j(\theta) &= 2(\gamma_j - \alpha_j \theta) \end{aligned}$$

mit α_j, γ_j , wie in (2.6) für das Upwind-Verfahren dritter Ordnung definiert wurde.

Die Verallgemeinerung des Limiters nach Koren für das positive κ -scheme auf ungleichmäßigen Gittern kann nun wie folgt definiert werden:

$$\phi(\theta_{j+\frac{1}{2}}) = \max \left\{ 0, \min \left\{ 2\theta_{j+\frac{1}{2}}, 2, 2(\gamma_j - \alpha_j \theta_{j+\frac{1}{2}}) \right\} \right\}. \quad (2.16)$$

2.2 Explizite Zeitintegrationsverfahren

In diesem Abschnitt wird kurz auf Zeitintegrationsverfahren eingegangen, insbesondere auf die expliziten Runge-Kutta Verfahren. Im späteren Kapitel 4 werden auch implizite Lösungsverfahren vorgestellt.

2.2.1 Explizite Runge-Kutta Verfahren

Gegeben sei das Anfangswertproblem eines Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$w'(t) = F(t, w(t)), \quad t > 0, \quad w(0) = w_0, \quad (2.17)$$

mit der Funktion $F : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ und den Anfangswerten $w_0 \in \mathbb{R}^n$. Die Lösung $w(t)$ wird zu jedem Zeitpunkt $t_n = n\tau$, $n = 0, 1, 2, \dots$ mit der Zeitschrittweite τ , berechnet, siehe [12]. Sofern nicht anders vorgegeben sei τ eine feste Schrittweite.

Runge-Kutta Verfahren sind so genannte Einschrittverfahren, weil diese Verfahren bei jeder Berechnung nur auf den zurückliegenden Zeitschritt zurückgreifen. D.h., um die Näherungslösung w_{n+1} zum Zeitpunkt t_{n+1} zu berechnen, wird nur der Wert w_n zum Zeitpunkt t_n benötigt. Während eines Schrittes werden mehrere Zwischenschritte berechnet, bezeichnet mit $W_i \approx w(t_n + c_i\tau)$, $i = 1, 2, \dots, s$, wobei s die Anzahl der Zwischenschritte (Stufen des Verfahrens) ist.

$$\begin{aligned} w_{n+1} &= w_n + \tau \sum_{i=1}^s b_i F(t_n + c_i\tau, W_i), \\ W_i &= w_n + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij} F(t_n + c_j\tau, W_j), \quad i = 1, 2, \dots, s, \end{aligned}$$

beschreibt die allgemeine Form der Runge-Kutta Verfahren mit den zugehörigen Koeffizienten a_{ij} , b_i und c_i . Die Runge-Kutta Verfahren werden oft in so genannten Butcher-Tableaus dargestellt, siehe Tabelle 2.1.

Falls die Runge-Kutta Koeffizienten a_{ij} die Bedingung

$$\forall j \geq i : a_{ij} = 0$$

erfüllen, so wird das Verfahren als *explizit* bezeichnet. D.h., dass die W_j nur vom vorher berechneten $W_{j'}$, $j' < j$, abhängen. Andernfalls heißt das Verfahren *implizit* und die W_i werden, z.B. über iterative Verfahren, berechnet.

Verfahren allgemein					explizite Verfahren				
c_1	$a_{1,1}$	$a_{1,2}$	\cdots	$a_{1,s}$	c_1				
c_2	$a_{2,1}$	$a_{2,2}$	\cdots	$a_{2,s}$	c_2	$a_{2,1}$			
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots		
c_s	$a_{s,1}$	$a_{s,2}$	\cdots	$a_{s,s}$	c_s	$a_{s,1}$	\cdots	$a_{s,s-1}$	
	b_1	b_2	\cdots	b_s		b_1	\cdots	b_{s-1}	b_s

Tabelle 2.1: Butcher-Tableaus

Das einfachste explizite Verfahren ist das Euler-Vorwärts Verfahren (RK1):

$$w_{n+1} = w_n + \tau F(t_n, w_n). \tag{2.18}$$

Weitere explizite Runge-Kutta Verfahren sind der Tabelle 2.2 zu entnehmen.

$\begin{array}{c c} 0 & \\ \hline 1/2 & 1/2 \\ \hline & 0 \quad 1 \end{array}$ <p>RK2a Trapezregel</p>	$\begin{array}{c c} 0 & \\ \hline 1 & 1 \\ \hline & 1/2 \quad 1/2 \end{array}$ <p>RK2b Runge Verfahren</p>
$\begin{array}{c c} 0 & \\ 1/3 & 1/3 \\ 2/3 & 0 \quad 2/3 \\ \hline & 1/4 \quad 0 \quad 1/4 \end{array}$ <p>RK3a Heun Verfahren</p>	$\begin{array}{c c} 0 & \\ 1/3 & 1/3 \\ 1/2 & 0 \quad 1/2 \\ \hline & 0 \quad 0 \quad 1 \end{array}$ <p>RK3 Wicker/Skamarock [22]</p>
$\begin{array}{c c} 0 & \\ 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \quad 1/2 \\ 1 & 0 \quad 0 \quad 1 \\ \hline & 1/6 \quad 1/3 \quad 1/3 \quad 1/6 \end{array}$ <p>RK4 klass. Runge-Kutta Verfahren</p>	$\begin{array}{c c} 0 & \\ 1/2 & 1/2 \\ 1 & 1/2 \quad 1/2 \\ 1/2 & 1/6 \quad 1/6 \quad 1/6 \\ \hline & 1/6 \quad 1/6 \quad 1/6 \quad 1/2 \end{array}$ <p>SORK RK-Verfahren nach Shu/Osher [5]</p>

Tabelle 2.2: explizite Runge-Kutta Verfahren

2.2.2 Ordnungsbedingungen

Sei $t_n = n\tau$ ein fester Zeitpunkt. Der *lokale Fehler* $L(\tau)$ zum Zeitpunkt t_n ist die Differenz zwischen der exakten Lösung $w^*(t_n)$ und der angenäherten Lösung w_{n+1} zu einem gegebenen Anfangswert $w(t_n) = w_n$.

$$L(\tau) = |w^*(t_n) - w_{n+1}|. \quad (2.19)$$

Das Verfahren besitzt die Konsistenzordnung p (kurz: Ordnung p), wenn

$$L(\tau) = \mathcal{O}(\tau^p)$$

für $\tau \rightarrow 0$ gilt. Die Bestimmung der Ordnung p eines expliziten Runge-Kutta Verfahrens kann formell durch Untersuchung der Runge-Kutta Koeffizienten a_{ij} , b_i und c_i erfolgen. Um die Ordnungsbedingungen für die Koeffizienten zu erhalten, wird eine Taylorreihenentwicklung von $L(\tau)$ an der Gleichung (2.17) und der exakten Lösung zum Zeitpunkt t_n vorgenommen. $w^*(t_n)$ und w_n werden an der Stelle $\tau = 0$ entwickelt.

$$T(t_n) = F^{(0)}(w(t_n)) + \frac{\tau}{1!}F^{(1)}(w(t_n)) + \frac{\tau^2}{2!}F^{(2)}(w(t_n)) + \dots + \frac{\tau^p}{p!}F^{(p)}(w(t_n)) + \mathcal{O}(\tau^{p+1}).$$

Wenn alle Entwicklungsglieder der Taylorreihe, durch Koeffizientenvergleich, bis einschließlich der Ordnung p verschwinden, so besitzt das Verfahren die Ordnung p .

Das einfache Euler-Vorwärts Verfahren (2.18) ist von erster Ordnung und genügt der Bedingung $\sum_{i=1}^s b_i = 1$.

Weitere Ordnungsbedingungen sind der Tabelle 2.3 zu entnehmen (siehe auch [12] S. 153, [8] S. 148).

Ordnung p	Ordnungsbedingung
1	$\sum_{i=1}^s b_i = 1$
2	$\sum_{i=1}^s b_i c_i = 1/2$
3	$\sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = 1/3$ $\sum_{i=2}^s \sum_{j=1}^{i-1} b_i a_{ij} c_j = 1/6$
4	$\sum_{i=2}^s b_i c_i^3 = 1/4$ $\sum_{i=2}^s \sum_{j=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j = 1/8$ $\sum_{i=2}^s \sum_{j=1}^{i-1} b_i a_{ij} c_j^2 = 1/12$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} \sum_{k=1}^{j-1} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = 1/24$

Tabelle 2.3: Ordnungsbedingungen expliziter Runge-Kutta Verfahren

2.3 Volldiskretisierung

In Kapitel 2.1 und 2.2 wurden die Ortsdiskretisierung und die diskrete Zeitintegration vorgestellt. Im folgenden werden die Ort- und Zeitdiskretisierungen kombiniert, um so ein örtlich und zeitlich diskretisiertes Verfahren zu erhalten.

2.3.1 CFL-Bedingung

Um ein stabiles Gesamtverfahren aus Ort- und Zeitdiskretisierung zu erhalten, muss der Zeitschritt τ begrenzt werden. In der Literatur ([12], S. 102 ff) wird die Stabilitätsbedingung auch CFL-Bedingung genannt nach Courant, Friedrich und Lewy (1928, [4]) und hängt vom gesamten Verfahren ab, da im allgemeinen die Ort- und Zeitdiskretisierung nicht unabhängig voneinander sind. Die CFL-Bedingung lautet:

$$\tau \leq \text{CFL} \frac{h}{|u|}$$

mit u die Geschwindigkeit der Advektion oder genauer die Wellengeschwindigkeit, h die Ortsschrittweite und CFL die CFL-Zahl. Für ungleichmäßige Gitter lautet die CFL-Bedingung:

$$\tau \leq \text{CFL} \min_j \left\{ \frac{h_j}{|u(0, x_j)|} \right\},$$

so dass die kleinste Ortsschrittweite h_j im Untersuchungsgebiet, den globalen Zeitschritt limitiert. Diese Bedingung gilt allerdings nur für Runge-Kutta Verfahren, wie später in Kapitel 4 gezeigt wird.

Die max. CFL-Zahl basiert auf der Kombination von Ortsdiskretisierungen und Zeitintegrationsverfahren, um die Stabilität der Verfahren zu gewährleisten. Beispiele für max. CFL-Zahlen auf gleichmäßigen Gittern sind der Tabelle 2.4 zu entnehmen.

Die Konsequenzen einer Verletzung der CFL-Bedingung sind in Abb. 2.9 dargestellt. Dazu sei der Anfangswert

$$c(x, 0) = \sin^{10}(\pi x)$$

gegeben. Die Profile in Abb. 2.9(a), (b) wurden auf einen gleichmäßigen Gitter $h_j \equiv h$ mit einen Zeitschritt kleiner oder gleich dem maximalen Zeitschritt berechnet, der durch die CFL-Bedingung bestimmt wird. Die Lösungen sind stabil. Die Abb. 2.9 (c)-(f) wurden mit CFL-Zahlen berechnet, die größer der maximalen CFL-Zahl sind. Hier ist eindeutig zu sehen, dass die Lösung instabil wird und somit das Verfahren zusammenbricht.

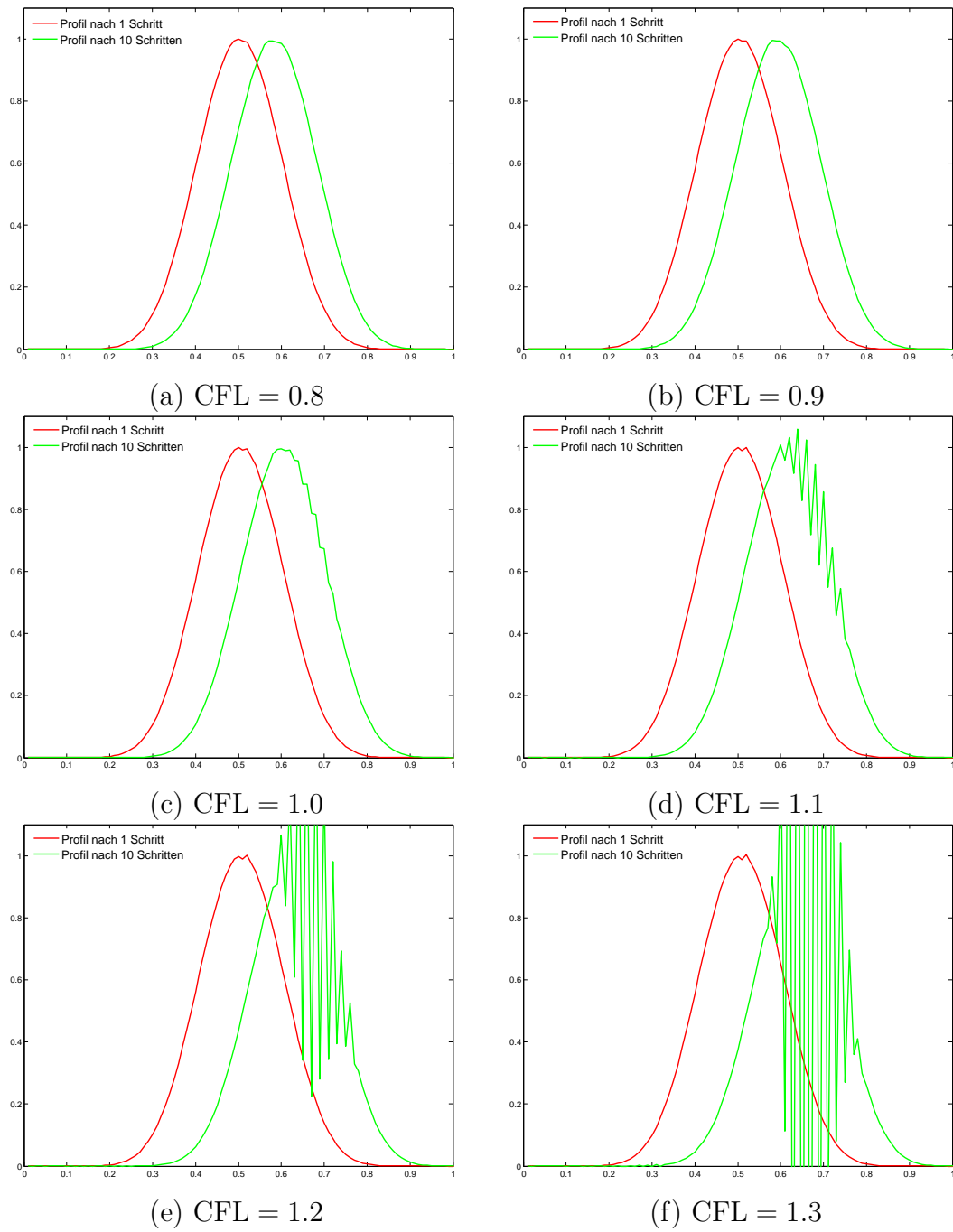


Abbildung 2.9: Profile gelöst mit RK2a über *third order upwind-biased scheme* für verschiedene CFL-Zahlen

	first order upwind	third order upwind	limitierter third order upwind
RK1	0.99	-	0.50
RK2a	0.99	0.93	0.99
RK2b	0.99	0.93	0.99
RK3a	1.25	1.62	1.25
RK3	1.25	1.62	1.10
RK4	1.38	1.74	1.39
SORK	1.95	1.97	1.52

Tabelle 2.4: Max. CFL-Zahl für ausgewählte explizite Runge-Kutta Verfahren

2.3.2 Gegenüberstellung der Diskretisierungen

Um die verschiedenen Kombinationen aus Ort- und Zeitdiskretisierung gegenüber zu stellen, werden die Verfahren auf den folgenden beiden Anfangsprofile

$$\begin{aligned}
 1. \text{ Rechteck : } c(x, 0) &= \begin{cases} 1, & \text{falls } 0.25 \leq x \leq 0.75 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \\
 2. \text{ Sinoid : } c(x, 0) &= \sin^{10}(\pi x)
 \end{aligned}$$

über ein gleichmäßiges Gitter mit $N = 100$ und $h \equiv \frac{1}{100}$ untersucht. Die Lösungen der Verfahren werden über ein Profil mit steilen Gradienten (Rechteck) und über ein glattes Profil (Sinoid) verglichen. Die Lösung wird nach einer Zeitperiode ($t=1$) untersucht.

Abb. 2.10 zeigt verschiedene Ortsdiskretisierungen, die mit dem expliziten Runge-Kutta Verfahren RK2a berechnet wurden. Dieses RK2a wird häufig bei Advektionsproblemen angewendet. Obwohl das einfache *third order upwind-biased scheme* für den Sinoid bei weitem die besten Ergebnisse liefert (kaum nennenswerte Schwingungen und Phasenfehler nur in der Nähe des Peaks), kann es nicht empfohlen werden. Die scharfen Ecken des Rechteckprofils, die eher für Szenarien in Luftverschmutzungsmodellen charakteristisch sind, führen sowohl zur Verletzung der Positivität als auch zu Über- und Unterschwingungen (Oszillationen). Das *first order upwind scheme* andererseits ist sehr diffusiv (Dämpfung der Lösung), so dass das Rechteckprofil in eine Sinoidform überführt wird und somit ungeeignet ist. Das limitierte *third order upwind scheme* wechselt zwischen den beiden vorherigen Upwind-Verfahren hin und her. Es ist also ein Kompromiss von annehmbaren Ergebnissen aus den nicht limitierten *third order upwind* und den *first order upwind*.

Abb. 2.11 zeigt das Verhalten von verschiedenen Runge-Kutta Verfahren angewendet auf das limitierte *third order upwind-biased scheme*. Das Euler-Vorwärts Verfahren erzielt für das Rechteckprofil die besten Ergebnisse. Der Grund dafür ist die Einfachheit des Verfahrens, welches vorteilhaft für das Rechteck-Profil ist. Allerdings führt das Euler-Vorwärts Verfahren (siehe Sinoid) zu deutlichen Fehlern bei der Glattheit der Lösung. Es ist für das *third order upwind scheme* nicht stabil. Anstatt gigantischer Oszillationen, sorgt der Limiter dafür, dass nur diese Stufen entstehen. Die Runge-Kutta Verfahren höherer Ordnung liefern dagegen sehr gute Ergebnisse und führen zu deutlich weniger Glattheitsfehlern.

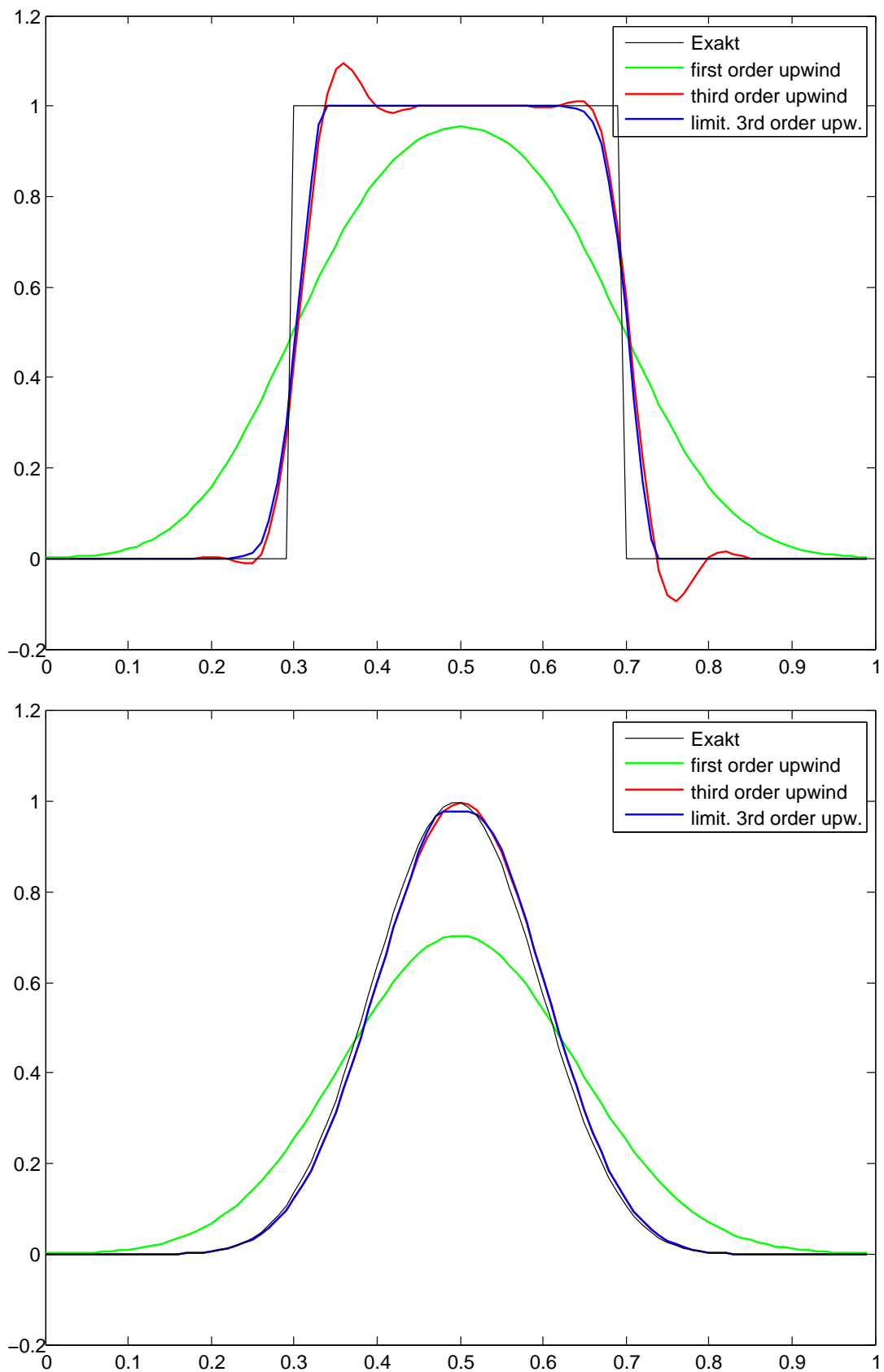


Abbildung 2.10: Verschiedene Ortsdiskretisierungen berechnet über RK2a und $CFL = 1/2$.

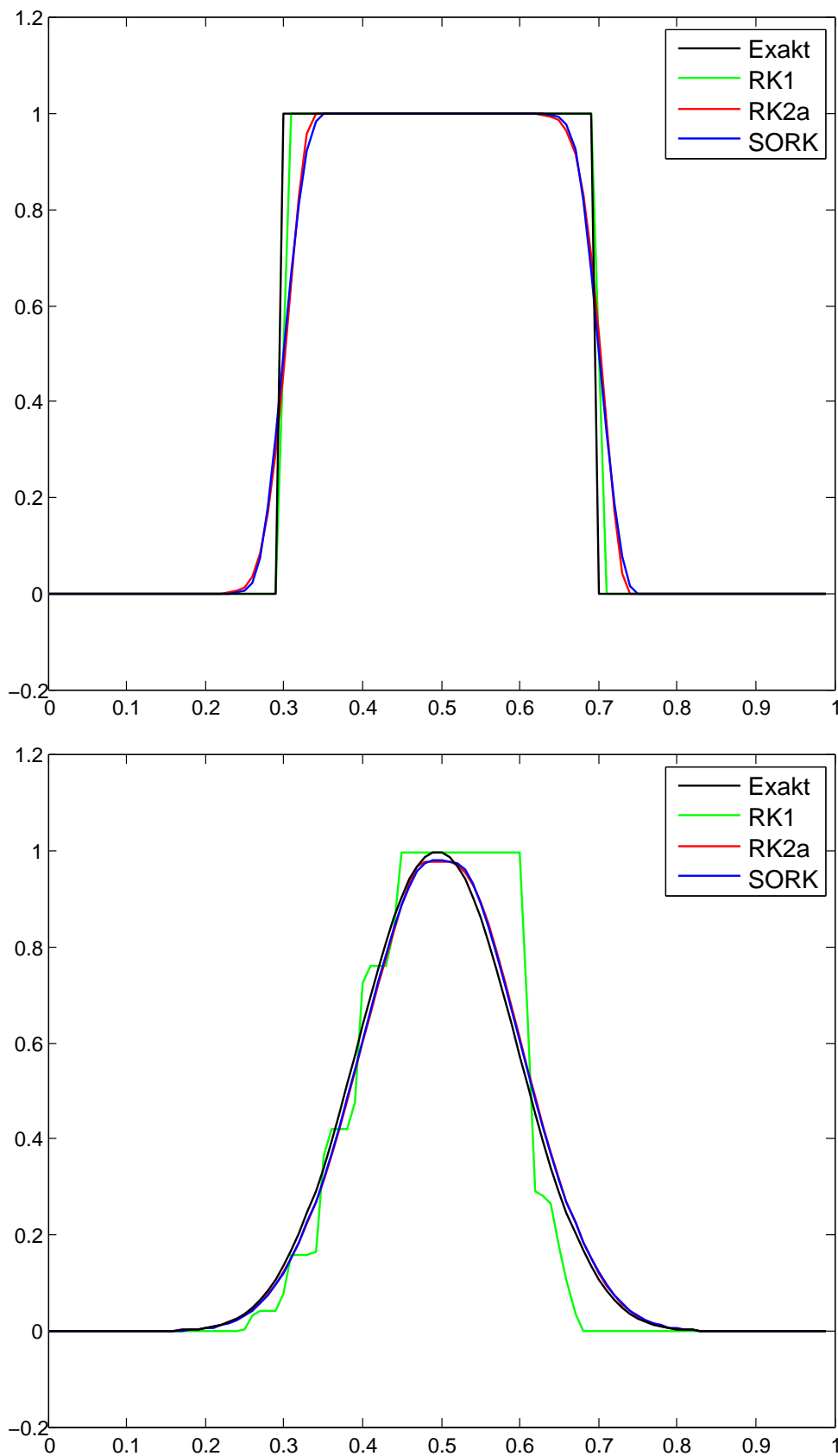


Abbildung 2.11: Profile mit limitierten *third order upwind-biased scheme* für verschiedene RK-Verfahren und $CFL = 1/2$.

Kapitel 3

Logarithmische Limiter

In Kapitel 2.1.3 wurde bereits der Limiter nach Koren vorgestellt, der auch als klassischer TVD-Limiter bezeichnet wird. Es gibt eine Vielzahl weiterer Limiter, wie den van Leer Limiter, MC Limiter (siehe jeweils [7]) usw., die, wie später zu sehen sein wird, unterschiedliche Vor- und Nachteile haben.

In diesem Kapitel werden zwei "logarithmische" Limiter vorgestellt. Zunächst ein logarithmischer Rekonstruktionsansatz nach Artebrant und Schroll, [1] und anschließend einen "logarithmischen" Limiter nach Čada und Torrilhon, [21]. In beiden Arbeiten wurde eine konstante Ortsschrittweite $h_j \equiv h$ vorausgesetzt. In dieser Diplomarbeit werden jedoch ungleichmäßige Gitter betrachtet. Deswegen wird eine Überleitung zu variablen Ortsschrittweiten h_j mit $j = 1, \dots, N$ an jeder Vorstellung angeschlossen.

3.1 Logarithmische Rekonstruktion

In Kapitel 2.1 wurden bereits polynomiale Rekonstruktionsansatz für die Gleichung (1.3) unter Verwendung von Limitern präsentiert. Nun wird ein logarithmischer Rekonstruktionsansatz nach R. Artebrant und H.J. Schroll [1] vorgestellt.

Motiviert wurden Artebrant und Schroll durch eine Arbeit von Marquina [17], der zum ersten mal einen hyperbolischen statt eines polynomialen Rekonstruktionsansatzes verwendete. In [17] erwiesen sich Hyperbeln als äußerst flexibel gegenüber Polynome.

Polynome sind nicht im Stande große Anstiege gefolgt von glatten Regionen zu approximieren. Deswegen entstehen ungewollte Oszillationen, die durch Limitierungen verhindert werden können. Diese Oszillationen ähneln dem Gibbs'schen Phänomen. Das Gibbs'sche Phänomen bezeichnet das typische Verhalten von Fourierreihen bei der Approximation von Sprungstellen.

Der Ansatz aus [17] wurde von Artebrant und Schroll in [1] aufgegriffen. Die Beiden

schlugen vor logarithmische Funktionen zur Rekonstruktion von (1.3) zu verwenden. Ihr Ergebnis ist ein *lokaler doppellogarithmischer Rekonstruktionsansatz* (LDLR) dritter Ordnung, der auf die Verwendung von Limitern gänzlich verzichtet und den gleichen Stencil (drei Mittelwerte) besitzt wie die polynomiale Rekonstruktion des *third order upwind-biased schemes*.

Das zugrunde liegende Gitter und weitere Variablen sind dem Abschnitt 2.1.1 zu entnehmen. Zunächst wird der Ansatz der Rekonstruktion vorgestellt. Zudem wird auf die Symmetrie des Rekonstruktionsansatzes eingegangen. Schließlich wird in Grundzügen die Beschränkung der Variation gezeigt und der Ablauf des Algorithmus erklärt.

Die Ansatzfunktion

Allgemein gilt:

Ein Rekonstruktionsansatz ist genau dann von dritter Ordnung, wenn für zwei Funktionen $f, g \in \Omega_j$ mit $h = b - a$ und

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b g(x) dx,$$

für die Ableitung ihrer Differenz gilt:

$$\begin{aligned} (f - g)'(a) &= \mathcal{O}(h^2) = (f - g)'(b) \\ \Rightarrow (f - g)(x) &= \mathcal{O}(h^3) \quad \forall x \in \Omega_j. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Der neue Rekonstruktionsansatz wird stückweise in jeder Gitterzelle $\Omega_j = [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ mit den fünf unbekanntenen Parametern A, B, C, D und E definiert:

$$r_j(x) \sim A + B \ln(x - x_j + C) + D \ln(x - x_j + E), \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.2)$$

Zur Interpolation werden der Mittelwert w_j sowie die beiden Anstiege d_1 und d_2 in den Interface-Punkten $x_{j-\frac{1}{2}}$ und $x_{j+\frac{1}{2}}$ genutzt, analog zu (3.1):

$$\frac{1}{h} \int_{\Omega_j} r_j(x) dx = w_j, \quad (3.3)$$

$$r_j' \left(x_j - \frac{h}{2} \right) = d_1, \quad (3.4)$$

$$r_j' \left(x_j + \frac{h}{2} \right) = d_2. \quad (3.5)$$

Durch diesen Ansatz und dessen Nebenbedingungen soll der Interface-Wert $w_{j+\frac{1}{2}}$ an der Interface-Stelle $x_{j+\frac{1}{2}}$ bestimmt werden. Zur Vereinfachung der Bestimmung der Koeffizienten im Ansatz (3.2) wird für ein bel. $x \in \Omega_j$ mit Ortsschrittweite h die Funktion

$$\psi_j(x) = -\frac{ch}{a} \ln \left(x - x_j - \frac{h}{2} \left(\frac{2}{a} - 1 \right) \right) - \frac{dh}{b} \ln \left(x - x_j - \frac{h}{2} \left(\frac{2}{b} - 1 \right) \right),$$

mit den unbekanntem Parametern a , b , c und d definiert.

Unter Beachtung der Interpolationsbedingungen (3.3)-(3.5) kann der Rekonstruktionsansatz $r_j(x)$ folgendermaßen dargestellt werden:

$$r_j(x) = w_j + \psi_j(x) - \frac{1}{h} \int_{\Omega_j} \psi_j(\xi) d\xi, \quad x \in \Omega_j \quad (3.6)$$

mit w_j , den Mittelwert in Ω_j . Wie man sieht erfüllt dieser Ansatz automatisch die Interpolationsbedingung (3.3). Dieser Ansatz ist genau dann von dritter Ordnung, wenn (3.6) auch die Interpolationsbedingungen (3.4)-(3.5) erfüllt.

Symmetrie

Zur Bestimmung der Koeffizienten a , b , c und d stehen nun nur noch die beiden Interpolationsbedingungen (3.4) und (3.5) zur Verfügung. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} c + d &= d_1, \\ -\frac{d(a-1) + c(b-1)}{(a-1)(b-1)} &= d_2. \end{aligned}$$

So folgt, dass aus diesen zwei Gleichungen 4 Parameter bestimmt werden müssen. Durch Umformung lassen sich die Parameter c und d in Abhängigkeit von den Koeffizienten a und b sowie den Werten d_1 und d_2 hergeleitet werden.

$$c = \frac{(a-1)(d_2(1-b) - d_1)}{b-a}, \quad (3.7)$$

$$d = d_1 - c. \quad (3.8)$$

Schließlich müssen nur noch die Koeffizienten a und b definiert werden. Eine weitere Bedingung an den Rekonstruktionsansatz (3.6) ist die Symmetrie. Der Rekonstruktionsansatz ist genau dann symmetrisch, wenn gilt:

$$r'_j \left(x_j - \frac{h}{2} \right) = -r'_j \left(x_j + \frac{h}{2} \right)$$

und somit

$$r'(x_j) = 0.$$

Im Bezug auf die Daten ist die Rekonstruktion symmetrisch, wenn $d_1 = -d_2$ ist. Durch

$$r'_j(x_j)|_{d_1=-d_2} = 2d_2 \frac{ab - a - b}{(a-2)(a-1)} = 0$$

ergibt sich für den Koeffizient

$$b = \frac{a}{a-1}. \quad (3.9)$$

Die Rekonstruktion ist nach [1], Lemma 2.2 eindeutig definiert, sofern $a < 1$ und $b < 1$ sind. Die Gleichung (3.9) ist eine Funktion in Abhängigkeit von a und ist genau dann im Bereich $(-\infty, 1)$ definiert, falls $a \in (-\infty, 1)$ liegt.

Beschränkung der lokalen Variation und Algorithmus

Um eine Rekonstruktion mit möglichst kleiner Variation zu konstruieren, wird eine Begrenzung der lokalen Variation (LVB) benötigt. Die lokale Variation wird definiert durch

$$LV(r_j) = |r_{j+1} - r_j|.$$

$LV(r_j)$ ist genau dann begrenzt, wenn gilt:

$$LV(r_j) = \mathcal{O}(h).$$

Für den Rekonstruktionsansatz (3.6) gilt somit:

$$LV(r_j) = h \frac{a-1}{a-2} \left| \frac{\ln(1-a)(d_1+d_2)}{a} \right|.$$

Dies bedeutet, dass die lokale Variation durch den Parameter a gesteuert werden kann. Für weitere Details siehe [1], Kapitel 2.3. Für den Ansatz von a gilt nun die Beziehung

$$a(d_1, d_2) = 1 - 2 \frac{|d_1|^q |d_2|^q}{|d_1|^{2q} + |d_2|^{2q}} < 1, \quad \text{mit } q > 0. \quad (3.10)$$

Der Nenner $b - a$ des Koeffizienten c , Gleichung (3.7), wird genau dann Null, wenn $a = 0$. Daraus folgt eine Division durch Null, die mathematisch unlogisch ist. Deswegen wird am Ansatz (3.10) eine Toleranzgröße TOL angesetzt, die das Null werden von a verhindern soll.

In [1] wurde die Toleranz für das Einheitsintervall $x \in [0, 1]$ definiert. Die Größe

$$\text{TOL} = 0.1h^q$$

gilt nur für $h \ll 1$. Jedoch sind die Untersuchungsgebiete meist größer als das Einheitsintervall, folglich muss die Toleranz sich dementsprechend anpassen. So gilt für gleichmäßige Schrittweiten im Untersuchungsgebiet mit $x \in [0, L]$, wobei L die Länge des Gebietes ist, für die Toleranz:

$$\text{TOL} = 0.1 \left(\frac{1}{N} \right)^q$$

mit $1/N$ der kleinsten Ortsschrittweite im Untersuchungsgebiet.

So ergibt sich für den Koeffizient a , unter Berücksichtigung von TOL:

$$a = (1 - \text{TOL}) \left(1 + \text{TOL} - \frac{2|d_1|^q |d_2|^q + \text{TOL}}{|d_1|^{2q} + |d_2|^{2q} + \text{TOL}} \right) \quad (3.11)$$

mit $a \in [\text{TOL}(1 - \text{TOL}), 1 - \text{TOL}^2]$ und $q > 0$.

Letztendlich wird die lokale Variation durch den Exponent q beschränkt. Dieser wird definiert durch

$$q = 1 + \frac{1}{C \exp(1)} \quad \text{mit } C > 0.$$

Wobei der Koeffizient C die ausschlaggebende größer ist. Durch die Wahl von $C = 1$ ergibt sich für $q = 1.4$. Natürlich kann durch die Wahl eines kleineren C (größeres q) bessere Ergebnisse durch eine kleinere Variation erzielt werden, jedoch ist dies laut den Autoren in [1] nicht ratsam.

Durch den Koeffizienten a ist nun die logarithmische Rekonstruktion (3.6) auch in der lokalen Variation beschränkt. Somit kann nun die Berechnung des Interface-Wertes $w_{j+\frac{1}{2}}$ durch:

$$w_{j+\frac{1}{2}} = r_j(x_{j+\frac{1}{2}}) = w_j + ch\eta^\pm(a) + dh\eta^\pm(b), \quad (3.12)$$

$$\text{mit } \begin{cases} \eta^+(p) = -\frac{\ln(1-p)+p}{p^2}, & \text{falls } u > 0 \\ \eta^-(p) = \frac{(p-1)\ln(1-p)-p}{p^2}, & \text{falls } u \leq 0 \end{cases}$$

erfolgen. Der Algorithmus zur Berechnung des Flusses $f_{j+\frac{1}{2}}$ für positive Advektionsgeschwindigkeiten lautet nun:

Algorithmus BERECHNUNG DES FLUSSES $f_{j+\frac{1}{2}}$ IM FALL $u > 0$

for $j = 1, \dots, N$

berechne die beiden Anstiege $d_1 = (w_j - w_{j-1})/h$ und $d_2 = (w_{j+1} - w_j)/h$;

berechne Koeffizienten a, b, c und d nach (3.7)-(3.11);

berechne $f_{j+\frac{1}{2}} = u(w_j + ch\eta^+(a) + dh\eta^+(b))$

Ende for

Ende Algorithmus

Eine Verallgemeinerung des LDLR auf ungleichmäßige Gitter ist möglich, wenn die Ortsschrittweite variabel gesetzt wird, d.h., $h = h_j$ mit $j = 1, \dots, N$.

Der hier vorgestellte logarithmische Rekonstruktionsansatz bietet eine gute Möglichkeit anstelle eines polynomialen Rekonstruktionsansatzes, da dieser auf die Verwendung von Limitern verzichtet. Die lokale und symmetrische Natur des LDLR erlaubt eine einfachere, viel effizientere Formulierung, als durch die Benutzung einer Limiterfunktion. Doch zeigt sich in Abschnitt 3.3, dass der LDLR eine sehr kleine Ortsschrittweite benötigt, damit ein Anfangswertproblem optimal approximiert werden kann. Dadurch und durch die Logarithmen kommt es zu einem höheren Rechenaufwand des LDLR, der ein Nachteil dieses Ansatzes ist. Da bei den in der Literatur üblich verwendeten Ansätzen keine logarithmischen Operationen verwendet werden, sind diese jedoch steifer als hyperbolische bzw. logarithmische Ansätze (Vergleiche [1], [17]), allerdings ist ihr Rechenaufwand geringer und das spricht wiederum für die polynomialen Rekonstruktionsansätze. Ein weiterer Nachteil des LDLR ist, dass keine strikte Positivität (TVD) gewährleistet werden kann, sondern nur lokale Positivität vorliegt. Das liegt in der Natur der logarithmischen Funktion.

3.2 "Logarithmischer" Limiter

Der Vorteil des LDLR ist, dass starke Oszillationen reduziert werden und praktisch gar nicht auftreten. Motiviert durch diese Eigenschaft des nichtpolynomialen Rekonstruktionsansatzes nach Artebrant und Schroll, [1] und den *local harmonic hyperbolic reconstruction* (LHHR) nach Marquina, [17] haben Čada und Torrilhon eine Möglichkeit gesucht, die Eigenschaften des logarithmischen Ansatzes des LDLR auf einen polynomialen Rekonstruktionsansatz als Limiter zu übertragen, [21].

Das Ergebnis ist eine Klasse von effizienten *third order schemes* mit einem kompakten 3-Punkte Stencil. Die Interface-Werte zwischen zwei benachbarten Zellen werden durch

eine einzelne nichtlineare Limiterfunktion bestimmt. Die neue Limiterfunktion ist eine auf den LDLR basierende Funktion, die an die upwind-basierende lokale Polynomrekonstruktion dritter Ordnung (siehe Kapitel 2.1) gesetzt wird, [21].

Zunächst wird ein modifizierter Limiter des Limiters nach Koren mit logarithmischen Eigenschaften und anschließend der neue Limiter $\text{Lim}\mathcal{O}3$, unter Beachtung bestimmter Bedingungen, vorgestellt.

Modifizierter Limiter nach Koren

In diesem Unterabschnitt wird eine neue Limiterfunktion präsentiert, welche auf den polynomialen Rekonstruktionsansatz dritter Ordnung basiert. Die meisten Limiter erfüllen Harten's TVD-Bedingungen, [24]

$$0 \leq \phi(\theta) \leq 2\theta \quad \text{und} \quad 0 \leq \phi(\theta) \leq 2$$

und besitzen somit nur eine Genauigkeit von zweiter Ordnung. Der neue Limiter soll aber eine Genauigkeit von dritter Ordnung besitzen und somit den Rekonstruktionsansatz dritter Ordnung effizienter machen. Basierend auf den LDLR lässt sich eine Limiterfunktion

$$\phi(\theta) = \frac{p((p^2 - 2p\theta + 1) \ln p - (1 - \theta)(p^2 - 1))}{(p^2 - 1)(p - 1)^2} \quad (3.13)$$

mit

$$p = p(\theta) = 2 \frac{|\theta|^q}{1 + |\theta|^{2q}}$$

herleiten. Die Herleitung dieses logarithmischen Limiters ist der Anlage von [21] zu entnehmen. Der Exponent q kontrolliert die TVD der Rekonstruktion wie bei Artebrant und Schroll [1].

Aufbauend auf diesen logarithmischen Limiter soll nun eine modifizierte Version des Limiters nach Koren konstruiert werden, der keinen Logarithmus mehr benötigt. Die erforderlichen Eigenschaften des neuen Limiters $\hat{\phi}(\theta)$ sind:

- 1.) $\phi(1 + h) = 1 + \frac{h}{3} + \mathcal{O}(h^m)$ und $\phi(-1 + h) = \frac{1}{3} + \frac{h}{3} + \mathcal{O}(h^n)$ mit $n, m \geq 2$,
- 2.) $\lim_{\theta \rightarrow 0} \phi(\theta) \rightarrow 0$ und $\lim_{\theta \rightarrow \pm\infty} \phi(\theta) \rightarrow 0$.

Die erste Bedingung garantiert eine genaue Auflösung von dritter Ordnung $\mathcal{O}(h^3)$ dieses neuen Limiters an lokalen Extrema, die durch $\theta = \pm 1 + h$ bestimmt wird. Die zweite

Bedingung sagt aus, dass die lokale Variation im Bereich von Unstetigkeiten beschränkt sein soll.

Die Bedingungen 1.) und 2.) im Auge behaltend, ist es möglich, eine stückweise lineare Limiterfunktion mit einfachen Eigenschaften, wie die Verbesserung der Schockerfassungsfähigkeit, zu konstruieren. Ohne die Nutzung einer logarithmischen Funktion erhält man eine bessere Kontrolle über die Rekonstruktion und folglich auch auf die totale Variation. Der neue einfache Limiter lautet nun:

$$\hat{\phi}(\theta) = \max \left\{ 0, \min \left\{ \frac{2+\theta}{3}, \max \left\{ -a\theta, \min \left\{ b\theta, \frac{2+\theta}{3}, c \right\} \right\} \right\} \right\} \quad (3.14)$$

mit den Parametern a , b und c , die den folgenden Bedingungen genügen:

$$\begin{aligned} 0 &\leq a \leq 2, \\ 1 &\leq b \leq 2, \\ 1 &\leq c \leq 2. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Diese Parameter kontrollieren die Eigenschaften der TVD des Limiters $\hat{\phi}(\theta)$, wie der Exponent q bei der logarithmischen Rekonstruktion (3.12) nach Artebrant und Schroll, [1].

Die Variablen a und b begrenzen die Variation von $\hat{\phi}(\theta)$ für $\theta \in (-\infty, 0]$ und $\theta \in [0, 1]$. Der letzte Parameter c ist die obere Grenze der Rekonstruktion dritter Ordnung mit $\theta \in [1, +\infty)$.

Durch setzten von $a = 0$ und $b = c = 2$ ergibt sich für $\hat{\phi}(\theta)$ der Limiter nach Koren (2.16), welcher auch klassischer TVD-Limiter genannt wird.

$$\phi^{TVD}(\theta) = \max \left\{ 0, \min \left\{ 2\theta, \frac{2+\theta}{3}, 2 \right\} \right\}.$$

So folgt, dass der neue Limiter $\hat{\phi}(\theta)$ eine Modifikation des Limiters nach Koren ist, der die logarithmischen Eigenschaften nach Artebrant und Schroll besitzt, [21]. Zudem erfüllt $\hat{\phi}(\theta)$ die Eigenschaft der Erhaltung der Masse (siehe Kapitel 2.1.2). Die Positivität wird erfüllt, wenn die Koeffizienten a , b und c bestimmte Werte annehmen.

$$a = 0.5; \quad b = 2; \quad c = 1.6.$$

Für den Limiter (3.14) ergibt sich somit:

$$\hat{\phi}(\theta) = \max \left\{ 0, \min \left\{ \frac{2+\theta}{3}, \max \left\{ -0.5\theta, 0, \min \left\{ 2\theta, \frac{2+\theta}{3}, 1.6 \right\} \right\} \right\} \right\}. \quad (3.16)$$

Ein weiteres Merkmal von $\hat{\phi}(\theta)$ ist, dass dieser Limiter keine Symmetrie besitzt wie klassische TVD-Limiter (vergleiche Čada und Torrilhon, [21]).

Neuer Limiter LimO3

Bisher wurde ein neuer Limiter vorgestellt, der glatte Extrema durch ein quadratisches Polynom rekonstruiert, mit $\theta \approx \pm 1$. Leider ist in dieser Form die Genauigkeit immer noch entartet, da an Extremstellen der Limiter zur *first order upwind* Ortsdiskretisierung umschaltet. Dieses Problem soll nun für den Limiter an Extrema mit $\theta \approx \pm 0$ betrachtet werden.

Die oben eingeführte Bedingung 1.) garantiert die dritte Ordnung des Limiters durch $\theta = \pm 1 + h$. Durch Ersetzen der Ortsschrittweite h durch eine konstante Größe $c \in \mathbb{R}$ wird die Bedingung 1.) verallgemeinert, $\theta = \pm 1 + |c|$. Die Konstante c wird als das Maß der Krümmung, einer Funktion zwischen zwei benachbarten Zellen, bezeichnet. Für ein großes $|c|$ müssen die diskretisierten Anfangswerte vollständig limitiert werden. Die Charakteristik eines Limiters mit einer großen Konstanten $|c|$ für lineare Funktionen zu rekonstruieren wird oftmals als überkomprimiert bezeichnet. Diese Überkomprimierung wird durch die TVD-Bedingung kontrolliert und das erhält die dritte Ordnung des Limiters.

Der LDLR-Algorithmus (siehe Abschnitt 3.1) sowie der logarithmische Limiter (3.13) und der einfache Limiter (3.16) angewendet auf den polynomialen Rekonstruktionsansatz (2.10) sind von dritter Ordnung. Allerdings werden an lokalen Extrema, für die $\theta \rightarrow 0$ oder $\theta \rightarrow \pm\infty$ geht, Genauigkeitsverluste der Limiter zugelassen. Trotzdem sind glatte Extrema, wie z.B. ein Sinoid, immer in der Rekonstruktion beschränkt.

Um diesen Nachteil abzuwenden, muss der Limiter (3.16) erweitert werden. Dafür wurde eine auf der asymptotischen Region basierende Indikatorfunktion η eingeführt.

$$\eta = \frac{(w_{j+1} - w_j)^2 + (w_j - w_{j-1})^2}{(rh)^2}. \quad (3.17)$$

Diese ist eine Funktion in Abhängigkeit von dem Anstiegsverhältnis θ . Außerdem hängt η von der Ortsschrittweite h und einer dimensionslosen Konstanten $r \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ ab. Die Konstante r bezeichnet den Radius der asymptotischen Region mit $0.001 \leq r \leq 1$, [21].

Letztendlich lautet nun der neue Limiter $\text{Lim}\mathcal{O}3$:

$$\phi^{\mathcal{O}(3)}(\theta) = \begin{cases} \frac{2+\theta}{3}, & \text{falls } \eta \leq 1 - \epsilon \\ \hat{\phi}(\theta), & \text{falls } \eta \geq 1 + \epsilon \\ \frac{1}{2} \left(\left(1 - \frac{\eta-1}{\epsilon}\right) \frac{2+\theta}{3} + \left(1 + \frac{\eta-1}{\epsilon}\right) \hat{\phi}(\theta) \right), & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.18)$$

mit $\epsilon > 0$ genügend klein. Das Problem des neuen Limiters, die Erhaltung von glatten Extrema und der simultanen Rekonstruktion scharfer Gradienten wurde strikt getrennt. Folglich ist das Auftreten einer Diskontinuität des neuen Limiters erträglich $\phi^{\mathcal{O}(3)} \rightarrow \hat{\phi}(0) = 0$ mit $\mathcal{O}(h^2)$.

Die Verallgemeinerung des Limiters auf ungleichmäßige Gitter erfolgt wie beim Limiter nach Koren (2.16). Für variable Ortsschrittweiten h_j mit Windgeschwindigkeiten $u > 0$ wird der Term

$$K(\theta) = \frac{2+\theta}{3} \quad \text{überführt zu} \quad \tilde{K}(\theta) = 2(-\alpha_j + \gamma_j\theta)$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha_j &= -\frac{h_j h_{j+1}}{(h_{j-1} + h_j)(h_{j-1} + h_j + h_{j+1})}, \\ \gamma_j &= \frac{h_j(h_{j-1} + h_j)}{(h_j + h_{j+1})(h_{j-1} + h_j + h_{j+1})}. \end{aligned}$$

Für den $\text{Lim}\mathcal{O}3$ folgt somit:

$$\phi^{\mathcal{O}(3)}(\theta) = \begin{cases} 2(-\alpha_j + \gamma_j\theta), & \text{falls } \eta \leq 1 - \epsilon \\ \hat{\phi}(\theta), & \text{falls } \eta \geq 1 + \epsilon \\ \frac{1}{2} \left(\left(1 - \frac{\eta-1}{\epsilon}\right) 2(-\alpha_j + \gamma_j\theta) + \left(1 + \frac{\eta-1}{\epsilon}\right) \hat{\phi}(\theta) \right), & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.19)$$

mit

$$\hat{\phi}(\theta) = \max \{0, \min \{2(-\alpha_j + \gamma_j\theta), \max \{-0.5\theta, 0, \min \{2\theta, 2(-\alpha_j + \gamma_j\theta), 1.6\}\}\}\}.$$

3.3 Vergleich der Limiter

Um die logarithmische Rekonstruktion und die Limiter untereinander zu vergleichen, werden diese über dem Intervall $x \in [-1, 1]$ mit den Anfangsbedingungen:

$$c(x, 0) = \begin{cases} \frac{1}{6}G(x, \beta, z - \delta) + G(x, \beta, z + \delta) + 4G(x, \beta, z), & \text{falls } -0.8 \leq x \leq -0.6, \\ 1, & \text{falls } -0.4 \leq x \leq -0.2, \\ 1 - |10(x - 0.1)|, & \text{falls } 0 \leq x \leq 0.2, \\ \frac{1}{6}(F(x, \alpha, a - \delta) + F(x, \alpha, a + \delta) + 4F(x, \alpha, a)), & \text{falls } 0.4 \leq x \leq 0.6, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

mit

$$G(x, \beta, z) = e^{-\beta(x-z)^2},$$

$$F(x, \alpha, a) = \sqrt{\max\{1 - \alpha^2(x - a)^2, 0\}}$$

und den Koeffizienten

$$a = 0.5, \quad z = -0.7, \quad \delta = 0.005, \quad \alpha = 10, \quad \beta = \ln\left(\frac{2}{36}\delta^2\right)$$

untersucht. Die Anfangswerte sind eine Folge von einer scharfen Gauss-Glocke, einer Rechteckfunktion, einer scharfen Dreiecksfunktion und einer halben Ellipsenfunktion. Entnommen wurde das Anfangsprofil aus [13]. Die Randbedingungen seien periodisch mit $c(-1, t) = c(1, t)$. Sofern nicht anders deklariert, wurde das Anfangsprofil 20 Perioden lang untersucht ($t=20$) und die Ortsschrittweite sei konstant.

Abb. 3.1 zeigt den Vergleich der beiden Limiter nach Koren (2.16) und LimO3 (3.19). Oben mit einem Runge-Kutta Verfahren zweiter Ordnung und unten mit einem Verfahren dritter Ordnung. Die Ortsschrittweite sei jeweils $h = \frac{1}{200}$.

Die obere Abbildung zeigt die Limiter Koren und LimO3, berechnet mit dem RK2a. Es scheint offensichtlich, dass beide Limiter die Monotonie der Anfangswerte verletzen und keine Symmetrie besitzen, aber trotzdem strikt positiv bleiben und keine Über- bzw. Unterschwingungen auftreten. Trotzdem löst der Koren-Limiter die vier Wellenprofile besser als der LimO3. Diese Effekte können nur mit einem Verfahren zweiter Ordnung gezeigt werden.

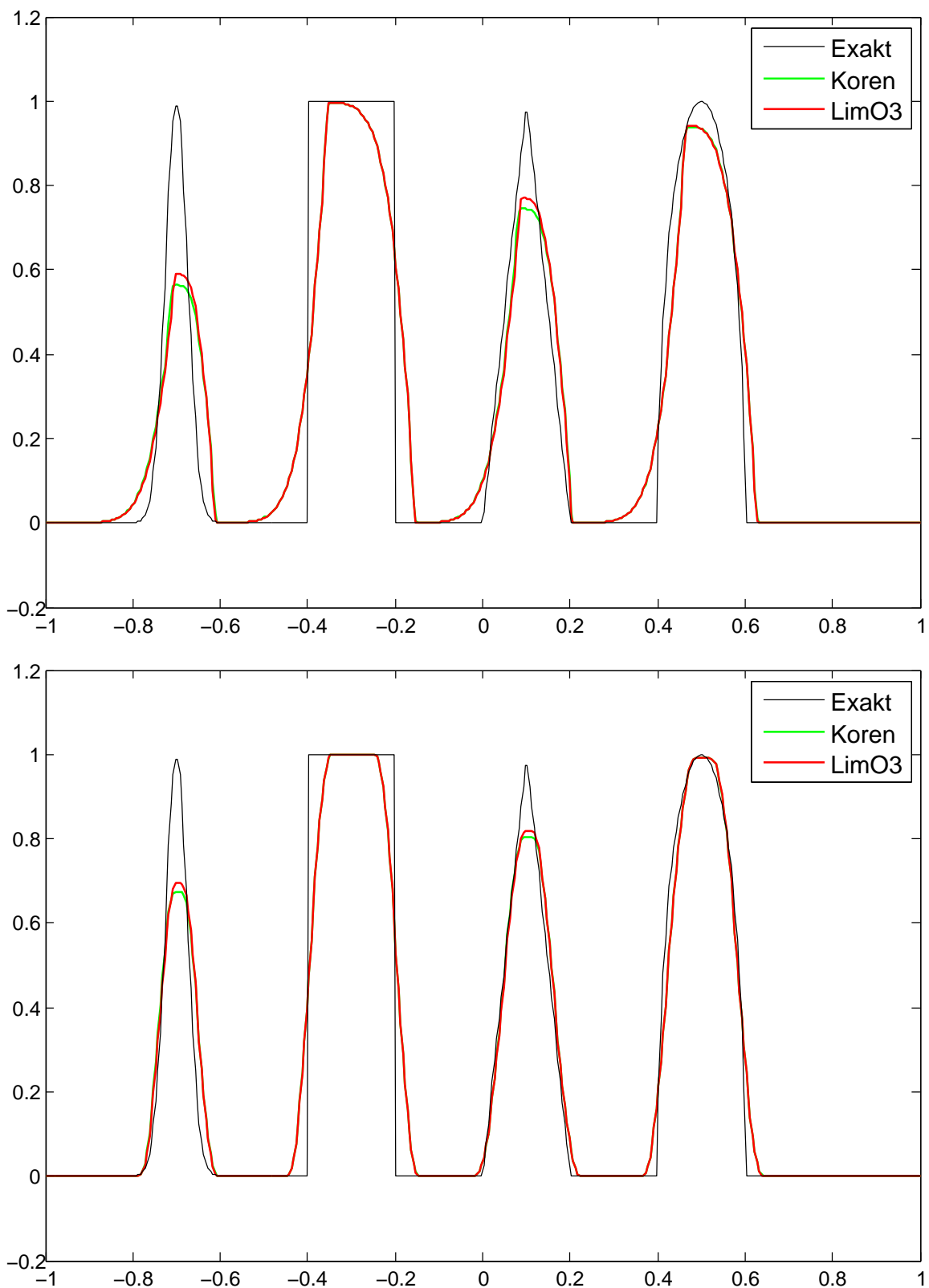


Abbildung 3.1: Vergleich der Limiter nach Koren und LimO3. Oben: mit RK2a, Verfahren zweiter Ordnung und $CFL = 0.8$, $t = 20$ und $N = 400$. Unten: mit SORk, Verfahren dritter Ordnung und $CFL = 0.8$, $t = 20$ und $N = 400$.

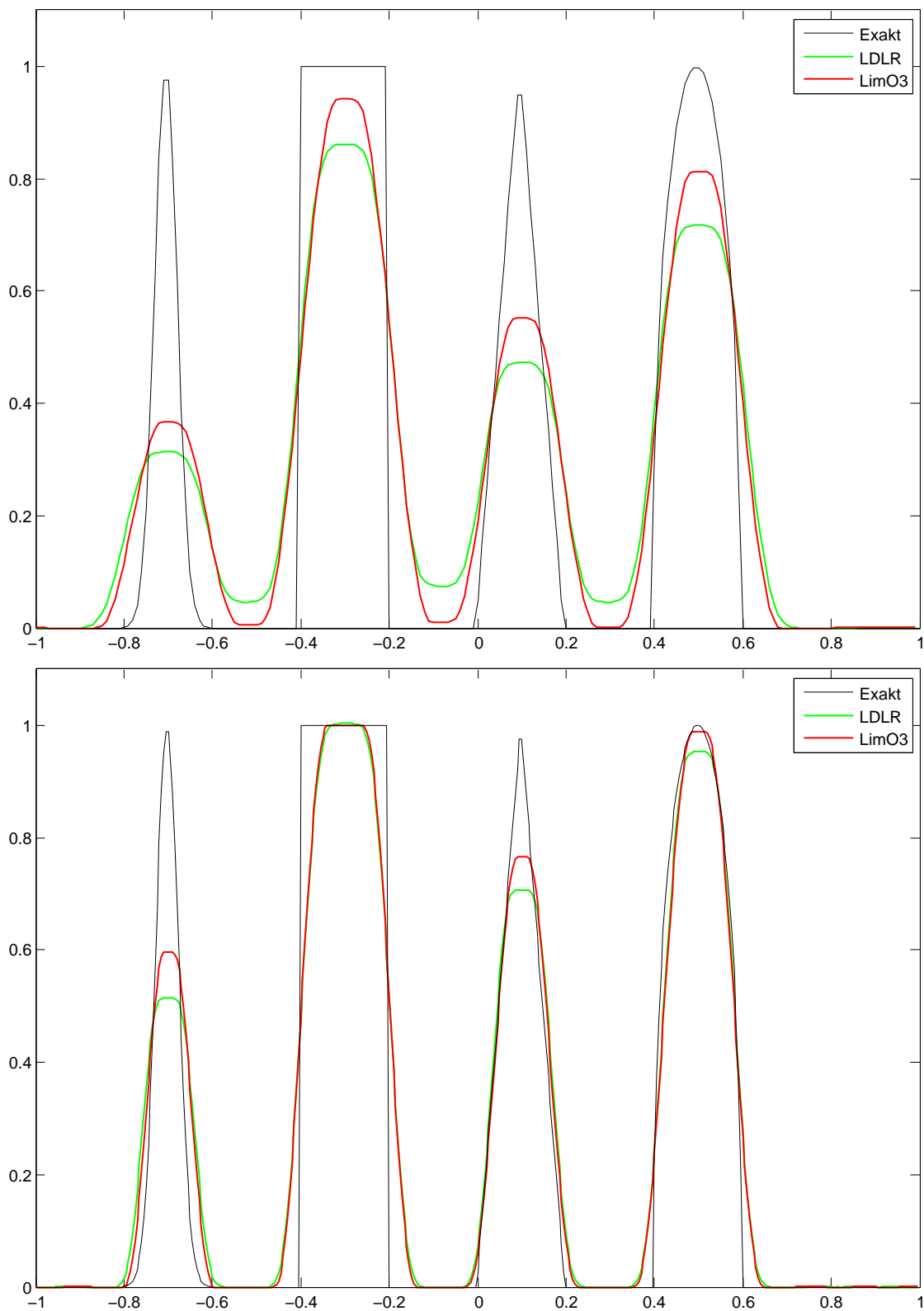


Abbildung 3.2: Vergleich des LDLR und des LimO3 mit unterschiedlichen Schrittweiten, berechnet über SORK. Oben: mit CFL = 0.8, $t = 20$ und $N = 200$. Unten: mit CFL = 0.8, $t = 20$ und $N = 400$.

Die untere Abbildung zeigt den Vergleich des Limiters nach Koren und den LimO3 berechnet mit SORK, einem Verfahren dritter Ordnung. Festzustellen ist, dass kaum nennenswerte Unterschiede zwischen den beiden Limitern bestehen. Der LimO3 besitzt an Stellen, an denen die Anfangswerte den Wert Null annehmen kleine Über- und Unterschwingungen, die von der logarithmischen Eigenschaft des Limiters stammen. Obwohl die Oszillationen auftreten, verhindert die asymptotische Region mit Radius $r = 0.01$ die Deformierung der Anfangswerte, siehe dazu auch [21] und Abb. 3.3.

Abb. 3.2 zeigt den Vergleich der logarithmischen Rekonstruktion (LDLR) nach Arterbrant/Schroll (3.12) und des von Čada und Torrillon entwickelten LimO3 (3.19). Beide Abbildungen wurden mit SORK berechnet und auf unterschiedlichen Ortsschrittweiten untersucht.

Die obere Abbildung zeigt den LDLR und den LimO3 mit einer konstanten Ortschaftweite $h = 1/100$ und $N = 200$. Im direkten Vergleich ist zu ersehen, dass der LDLR diffusiver ist als der LimO3. Dieser approximiert das Wellenprofil genauer als der LDLR. Beide Limiter erhalten ihre Symmetrie.

Die untere Abbildung zeigt beide Limiter bei einer konstanten Schrittweite $h = 1/200$ und $N = 400$. Beide, LimO3 und LDLR sind ungefähr von der gleichen Qualität, wobei der LimO3 einen höheren Gaussian Peak besitzt und leichte Überschwingungen bei der Halbellipse produziert. Bei allen beiden Methoden treten negative Werte auf, wobei die beim LimO3 geringer sind als beim LDLR. Das liegt an der logarithmischen Eigenschaft, die beim LimO3 durch die asymptotische Region r im Bereich von Sprungstellen bzw. großen Unstetigkeiten reduziert werden kann. Damit kann keine strikte Positivität mehr erreicht werden. Deswegen wurden für den LDLR und dem LimO3 schwächere Positivitätsbedingungen aufgestellt, die die lokale Variation beschränken.

Abb. 3.3 zeigt zwei verschiedene Teillösungen der Advektionsgleichung: eine mit der Rechteckfunktion und eine mit der Sinusfunktion als Anfangswerte, vergleiche Abschnitt 2.3.2. Das Bild zeigt die Auswirkung der asymptotischen Region zu verschiedenen Radien r . Für einen kleinen Radius $r \leq 0.01$, benötigt der Limiter eine ausreichende Auflösung, ungefähr 200 Zellen, damit er unterscheiden kann zwischen einem glatten Extrema und einen scharfen Gradienten. Selbst für große Radien der asymptotischen Region ist im Grunde keine Begrenzung nötig, da das Verfahren nicht instabil wird. Jedoch ist das bei nicht-limitierten TVD-Verfahren zweiter Ordnung nicht der Fall, [21].

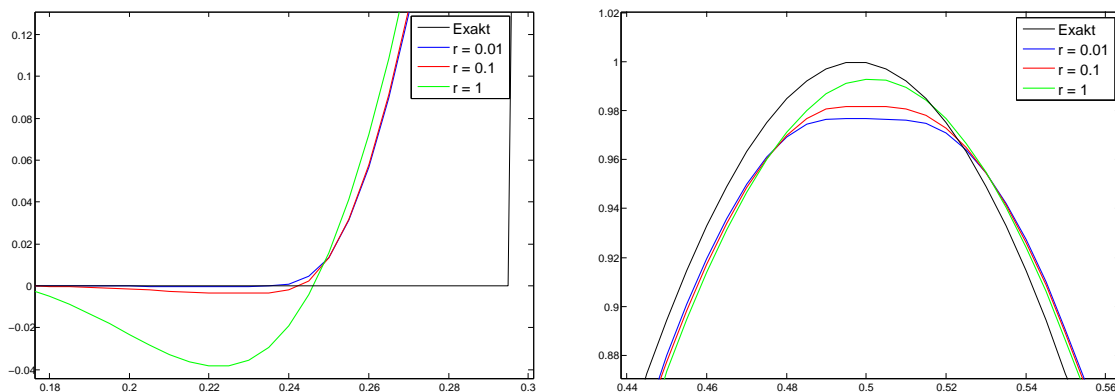


Abbildung 3.3: Advektionsgleichung über ein Rechteck-Profil (links) und ein Sinus-Profil (rechts) als Anfangswerte. Ergebnis wurde zum Zeitpunkt $t = 20$ mit $CFL = 0.8$ und $N=200$ für verschiedene Radien r der asymptotischen Region berechnet.

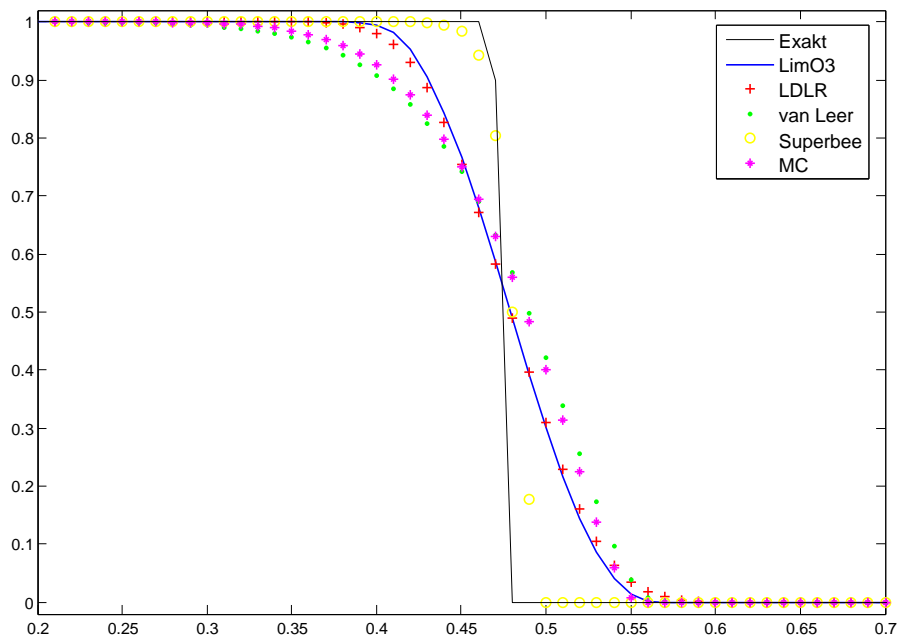


Abbildung 3.4: Verschiedene Limiter im Vergleich. Berechnet über $t = 20$ mit RK3a, $CFL = 0.8$ und $N = 100$.

In Abb. 3.4 wird der LimO3 und der LDLR mit weiteren Limitern verglichen. Der Limiter nach van Leer und der MC-Limiter scheinen diffusiv zu sein, denn sie approximieren das Testbeispiel sehr schlecht. Im Gegensatz dazu scheint der Superbee Limiter das Testbeispiel am besten zu approximieren. Der Superbee Limiter wird jedoch in dieser Diplomarbeit nicht weiter betrachtet. Der Grund dafür wird sich später noch zeigen. Der LimO3 und der LDLR liegen zwischen den Limitern. Sie scheinen ein guter Kompromiss aus den van Leer, MC und Superbee Limiter zu sein.

Kapitel 4

Implizite Zeitintegrationsverfahren

Ein großer Nachteil von expliziten Zeitintegrationsverfahren bei der numerischen Lösung der linearen Advektionsgleichung (1.3) auf ungleichmäßigen Gittern sind sehr kleine Zeitschritte, um die Stabilität der Verfahren zu sichern. Der maximale mögliche Zeitschritt für diese Verfahrensklasse ist beschränkt durch $\tau \leq \text{CFL} * \min_j \{h_j\}$. Die kleinste Ortschaftweite bestimmt daher den maximalen Zeitschritt. Falls nur eine Gitterzelle wesentlich kleiner ist, in einer sonst gleichmäßigen Gitterauflösung, kann der Rechenaufwand um das mehrfache steigen.

Eine Möglichkeit diese durch wenige Gitterzellen verursachten kleinen Zeitschritte zu vermeiden ist die Verwendung impliziter Zeitintegrationsverfahren. Im Gegensatz zu expliziten Verfahren ist zur Bestimmung des neuen Zeitschrittes die Lösung linearer bzw. nichtlinearer algebraischer Gleichungen erforderlich. Implizite Verfahren sind in der Regel für beliebige Zeitschritte stabil. Jedoch sind aus Genauigkeitsgründen auch hier nur Zeitschritte möglich, welche einer "mittleren" CFL-Zahl von 2 entsprechen. Eine Große Klasse impliziter Verfahren sind die impliziten Runge-Kutta Verfahren und die auf ihnen basierenden linear-impliziten Rosenbrock Methoden. Im weiteren wird auf die linear-impliziten Rosenbrock Verfahren und Rosenbrock W-Verfahren eingegangen, welche nur die Lösung linearer Gleichungen erfordern.

4.1 Rosenbrock Verfahren

Rosenbrock Verfahren sind Einschrittverfahren, die vom Typ der Runge-Kutta Verfahren und linear-implizit sind ([12], S. 151 ff.). Benannt wurden diese Verfahren nach Rosenbrock (1963, [19]), der als erster Verfahren dieser Art entwickelte.

Für das System gewöhnlicher Differentialgleichungen (2.17) lautet die Verfahrensvor-

schrift:

$$\begin{aligned}
 w_{n+1} &= w_n + \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\
 k_i &= \tau F \left(w_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j \right) + \tau J \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i = 1, \dots, s.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

wobei $J = J_n$ die Jacobi-Matrix von $F'(w_n)$ ist.

In jeder Stufe i muss zur Bestimmung von k_i ein System von linear algebraischen Gleichungen gelöst werden, mit der Koeffizientenmatrix $I - \tau\gamma_{ii}J$. Eine Motivation für die obige Verfahrensvorschrift ist die Verwendung von impliziten Runge-Kutta Verfahren, wobei zur Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme nur ein Newton-Schritt verwendet wird.

Damit in jeder Stufe die selbe Matrix bei der Lösung des notwendigen Gleichungssystems verwendet werden kann, werden die Koeffizienten γ_{ii} identisch gewählt, $\gamma_{ii} = \gamma$. Bei Verwendung direkter Verfahren zum lösen des linearen Gleichungssystems ist daher nur eine LU-Zerlegung pro Zeitschritt notwendig. Die Verfahrensvorschrift (4.1) lässt sich dann folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}
 w_{n+1} &= w_n + \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\
 S k_i &= \tau F \left(w_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j \right) + J \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} k_j, \quad i = 1, \dots, s \\
 \text{mit } S &= I - \tau\gamma J.
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

Ordnungsbedingungen

Wie bei den expliziten Runge-Kutta Verfahren werden die Konsistenzbedingungen durch Taylorreihenentwicklung des lokalen Fehlers $L(\tau)$ bestimmt. Die Ordnungsbedingungen erhält man schließlich durch den Vergleich der Koeffizienten beider Taylorreihen (Näherungslösung, exakte Lösung). Das Rosenbrock Verfahren ist von Ordnung p , falls alle Glieder der Taylorreihe bis einschließlich der Ordnung p verschwinden.

Die Ordnungsbedingungen für die Rosenbrock Verfahren können der Tabelle 4.1 mit den vereinfachten Koeffizienten

$$a_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}, \quad d_i = \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} + \gamma, \quad g_i = \sum_{j=1}^{i-1} (a_{ij} + \gamma_{ij}) = a_i + d_i - \gamma, \quad i = 1, 2, \dots, s$$

und

$$g_{ij} = a_{ij} + \gamma_{ij} \quad \forall i, j \quad \text{mit} \quad j < i,$$

entnommen werden. Vergleiche auch [12] (S. 152 ff.), [9] (S. 104 ff.) und [6] (Appendix A).

Ordnung p	Ordnungsbedingungen
1	$\sum_{i=1}^s b_i = 1$
2	$\sum_{i=2}^s b_i g_i = 1/2 - \gamma$
3	$\sum_{i=2}^s b_i a_i^2 = 1/3$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i g_{ij} g_j = 1/6 - \gamma + \gamma^2$
4	$\sum_{i=2}^s b_i a_i^3 = 1/4$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i a_i a_{ij} g_j = 1/8 - \gamma/3$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i g_{ij} a_j^2 = 1/12 - \gamma/3$ $\sum_{i=4}^s \sum_{j=3}^{i-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_i g_{ij} g_{jk} g_k = 1/24 - \gamma/2 + 3\gamma^2/2 - \gamma^3$

Tabelle 4.1: Ordnungsbedingungen der Rosenbrock Verfahren bis zur Ordnung 4.

Eine direkte Implementierung von (4.2) erfordert, neben der Lösung eines linearen Gleichungssystems, auch die Matrix-Vektor-Multiplikation $J \sum \gamma_{ij} k_j$. Um diese Multiplikationen zu vermeiden, kann das Verfahren umgeschrieben werden. Dazu werden die neuen Inkremente definiert durch

$$u_i = \frac{1}{\gamma} \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} k_j, \quad i = 1, \dots, s.$$

Falls $\gamma \neq 0$ ist, so ist die Matrix $\Gamma = (\gamma_{ij})$ invertierbar und die k_i können wieder durch die u_i zurückgewonnen werden:

$$k_i = u_i - \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} u_j, \quad B = (\beta_{ij}) = \frac{1}{\gamma} I - \Gamma^{-1}.$$

Durch einsetzen dieser Vorschrift in (4.2) erhält man schließlich:

$$(I - \tau\gamma J) u_i = \tau F(w_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} u_j) + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} u_j, \quad i = 1, \dots, s \quad (4.3)$$

$$w_{n+1} = w_n + \sum_{j=1}^s \chi_j u_j,$$

wobei

$$(a_{ij}) = \gamma(\alpha_{ij})\Gamma^{-1}, \quad (\chi_1, \dots, \chi_s) = \gamma(b_1, \dots, b_s)\Gamma^{-1}.$$

Ein in meteorologischen Anwendungen verwendetes zweistufiges Rosenbrock Verfahren ist das Ros3-AMF und wurde von Lanser u.a. in [16] entwickelt. Das Verfahren lautet:

$$\begin{aligned} Sk_1 &= \tau F(w_n), \\ Sk_2 &= \tau F\left(w_n + \frac{2}{3}k_1\right) - \frac{4}{3}\tau\gamma Jk_1, \\ w_{n+1} &= w_n + \frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_2, \\ S &= I - \gamma\tau J \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{1}{3} + \frac{1}{6}\sqrt{3}. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Das Verfahren eignet sich besonders zum lösen von steifen nichtlinearen gewöhnlichen Differentialgleichungssystemen. Getestet wurde das Ros3-AMF am Beispiel der sphärischen Flachwassergleichungen, die ein Prototyp-Modell der sphärischen Zirkulation darstellen. Insbesondere wurde in [16] gezeigt, dass mit derartigen linear-impliziten Verfahren das Problem kleiner Gitterzellen an den Polen keine Zeitschrittbeschränkungen mehr erfordert.

Die Ordnung p des Ros3-AMF (4.4) wird unter Beachtung der Jacobi-Matrix bestimmt. Für die Ordnungsbedingungen folgt:

$$b_1 + b_2 = 1, \quad b_2(a_{21} + \gamma_{21}) = 1/2 - \gamma, \quad b_2 a_{21}^2 = 1/3, \quad \gamma^2 - \gamma + 1/6 = 0 \quad \text{und} \quad b_2 \gamma_{21} = -\gamma.$$

Durch Einsetzen der Koeffizienten und unter Beachtung der fünften Bedingung $b_2 \gamma_{21} = -\gamma$, ergibt sich schließlich für das Ros3-AMF die Ordnung drei für $\gamma = 1/3 + 1/6\sqrt{3}$.

Die Implementierungsvorschrift (4.3) von (4.4) lautet nun:

$$\begin{aligned} Sk_1 &= \tau F(w_n), \\ Sk_2 &= \tau F\left(w_n + \frac{2}{3}k_1\right) - \frac{4}{3}k_1, \\ w_{n+1} &= w_n + \frac{5}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_2, \\ S &= I - \gamma\tau J \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{1}{3} + \frac{1}{6}\sqrt{3}. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass auch eine nährungsweise Jacobi-Matrix verwendet werden kann, welche durch einen Fehler $\mathcal{O}(\tau)$ von der exakten Jacobi-Matrix abweicht,

ohne dass sich die Ordnung reduziert. Dies ermöglicht insbesondere die Verwendung von approximativen Matrix Faktorisierungen (AMF) zur Lösung der linearen Gleichungssysteme. Die AMF kann formal durch die folgende Matrix-Zerlegung beschrieben werden:

$$J = J_1 + J_2. \quad (4.6)$$

Die Matrix S wird dann folgendermaßen approximiert:

$$\begin{aligned} S = (I - \tau J) &\approx (I - \tau J_1)(I - \tau J_2) \\ &= I - \tau(J_1 + J_2) + \mathcal{O}(\tau). \end{aligned}$$

Im Falle von im Ort zweidimensionalen Problemen kann das Lösen der linearen Gleichungssysteme auf eindimensionale Teilprobleme reduziert werden.

4.2 Rosenbrock W-Verfahren

Um den Aufwand zur Berechnung der Jacobi-Matrix und der Lösung der linearen Gleichungssysteme entscheidend senken zu können, wurden neben den Rosenbrock Verfahren die so genannten Rosenbrock W-Verfahren eingeführt. Diese wurden zum ersten mal von Wolfbrandt (1979, [20]) vorgeschlagen. Im Gegensatz zu den Rosenbrock Verfahren kann anstelle der exakten Jacobi-Matrix eine beliebige Matrix A verwendet werden. Deren Wahl wird dabei hauptsächlich durch die Stabilität des Verfahrens bestimmt. Die Ordnungsbedingungen werden nun so bestimmt, dass sie für beliebige Matrizen gelten.

Dies erlaubt insbesondere die Nutzung der oben erwähnten AMF-Technik, die Beibehaltung der Jacobi-Matrix über mehrere Zeitschritte oder die Berechnung der Jacobi-Matrix von Ortsdiskretisierungen niedriger Ordnung.

Ordnungsbedingungen

Die Ableitungen zur Bestimmung der Ordnungsbedingungen für diese W-Verfahren sind nicht die gleichen, wie bei den Rosenbrock Verfahren. So müssen bei der Überprüfung der Konsistenzordnung neue und eine Vielzahl weiterer Ordnungsbedingungen erfüllt werden. Beispielsweise müssen zur Bestimmung der Ordnung drei anstatt vier Bedingungen (siehe Tabelle 4.1), nun acht Bedingungen erfüllt werden.

In [9], S. 123 f., sind Ordnungsbedingungen bis einschließlich der Ordnung drei für Rosenbrock W-Verfahren gegeben, die der Tabelle 4.2 entnommen werden können.

Ordnung p	Ordnungsbedingungen
1	$\sum_{i=1}^s b_i = 1$
2	$\sum_{i=2}^s b_i a_i = 1/2$ $\sum_{i=2}^s b_i d_i = 0$
3	$\sum_{i=2}^s b_i a_i^2 = 1/3$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i a_{ij} a_j = 1/6$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i a_{ij} d_j = 0$ $\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i \gamma_{ij} a_j = 0$ $\sum_{i=2}^s b_i d_i^2 = 0$

Tabelle 4.2: Ordnungsbedingungen der Rosenbrock W -Verfahren bis zur Ordnung 3.

Das zuvor eingeführte Ros3-AMF soll nun auf die Ordnungsbedingungen der W -Methoden überprüft werden. Dazu wird die Verfahrensvorschrift (4.4) mit den Bedingungen in Tabelle 4.2 verglichen. Durch Überprüfung lässt sich feststellen, dass die Bedingungen für erster und zweiter Ordnung erfüllt sind, jedoch nicht die Bedingungen dritter Ordnung. Somit ist das Ros3-AMF als W -Methode mit einer beliebigen Matrix A nur von zweiter Ordnung.

4.3 RosRK3 Verfahren

Jedem Rosenbrock W -Verfahren ist ein explizites Runge-Kutta Verfahren zugeordnet, welches man durch die Wahl $A \equiv 0$ erhält. Es erscheint daher sinnvoll Rosenbrock W -Methoden zu konstruieren, da deren zugrunde liegendes explizite Runge-Kutta Verfahren gute Stabilitätseigenschaften für die Integration der linearen Advektionsgleichung besitzt. Eine derartige Idee findet man bei Freed und Iskovitz in [6], die ein Rosenbrock Verfahren vierter Ordnung basierend auf dem klassischen Runge-Kutta Verfahren RK4 konstruiert haben.

Das Ergebnis ist ein numerisches Zeitintegrationsverfahren, welches für steife und nicht steife Probleme geeignet ist. Mit dem kompatiblen Paar von expliziten Runge-Kutta und linear-impliziten Rosenbrock Verfahren wurde ein Schema entwickelt, welches während der Integration automatisch zwischen den beiden Verfahren hin und her schaltet, in Abhängigkeit von der Steifheit des Problems.

In dieser Diplomarbeit ist der Ausgangspunkt für eine derartige Konstruktion das bereits erwähnte dreistufige explizite Runge-Kutta Verfahren RK3 zweiter Ordnung (siehe

auch Tabelle 2.2).

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}
 \hline
 0 & & & \\
 \hline
 1/3 & 1/3 & & \\
 \hline
 1/2 & 0 & 1/2 & \\
 \hline
 & 0 & 0 & 1 \\
 \hline
 \end{array} \tag{4.7}$$

Das RK3 wird derzeit in mehreren Wettervorhersagemodellen (COSMO-Modell [3], WRF-Modell [23]) zur Zeitintegration genutzt. Hierbei ist das explizite Verfahren Teil eines Zeit-Splitt Verfahrens zur Integration des advektiven Anteils in den kompressiblen Euler-Gleichungen.

Dieses RK3 genügt den folgenden Konsistenz- bzw. Ordnungsbedingungen (siehe auch Tabelle 2.3):

Ordnung p	Bedingungen
1	$b_1 + b_2 + b_3 = 1$
2	$b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 = \frac{1}{2}$

Die maximal mögliche CFL-Zahl dieses Verfahrens wurde mit der unlimitierten Ortsdiskretisierung des *third order upwind schemes* bestimmt. In der nachfolgenden Tabelle sind die maximale CFL-Zahl und die maximale CFL-Zahl pro Stufe für das Verfahren RK3 und zusätzlich für das zweistufige Verfahren RK2 (Tabelle 4.8) zu entnehmen.

	max. CFL-Zahl	max. CFL-Zahl pro Stufe
RK3	1.62	0.540
RK2	0.87	0.435

Stellt man die maximale CFL-Zahl pro Stufe diesem RK2 zweiter Ordnung gegenüber, so ist zu sehen, dass das RK3 Verfahren wesentlich stabiler zu sein scheint, als das zweistufige Verfahren. Diese Überlegung wird später untersucht.

Auf Basis des eben vorgestellten dreistufigen Runge-Kutta Verfahrens RK3 soll nun ein neues linear-implizites Rosenbrock W-Verfahren entwickelt werden. Durch einsetzen der Runge-Kutta Koeffizienten aus (4.7) in die Verfahrensvorschrift (4.1) sind noch die vier Parameter $(\gamma_{21}, \gamma_{31}, \gamma_{32}, \gamma)$ frei wählbar, wobei für ein Verfahren zweiter Ordnung zwei Ordnungsbedingungen für Rosenbrock Verfahren sowie drei Bedingungen für W-Verfahren zu erfüllen sind.

Zur Bestimmung dieser Koeffizienten wurde ein Mathematica-Programm (Anlage B) geschrieben, welches die Ordnungsbedingungen für Rosenbrock Verfahren und W-Verfahren bis Ordnung vier bzw. drei berücksichtigt. Die Koeffizienten des neuen linear-impliziten RosRK3 können der Tabelle 4.3 entnommen werden.

0		γ	γ		
1/3	1/3	$\frac{1-9\gamma+24\gamma^2}{-9+36\gamma}$	$\frac{1-12\gamma^2}{-9+36\gamma}$	γ	
1/2	0 1/2	0	$-1/4 + 2\gamma$	$1/4 - 3\gamma$	γ
	0 0 1		0	0	0
\mathcal{A} -Matrix		Γ -Matrix			

Tabelle 4.3: Allgemeine Koeffizienten des RosRK3.

Die Erhaltung der Ordnung erfolgt unabhängig vom Parameter γ . Egal wie groß γ ist, das RosRK3 erfüllt immer die Bedingungen der Ordnung zwei. In der folgenden Tabelle 4.4 wurde $\gamma = 1$ gesetzt.

0		1	1		
1/3	1/3	16/27	-11/27	1	
1/2	0 1/2	0	7/4	-11/4	1
	0 0 1		0	0	0
\mathcal{A} -Matrix		Γ -Matrix			

Tabelle 4.4: Koeffizienten des RosRK3 für $\gamma = 1$.

Die neuen Koeffizienten der Implementierung des Verfahrens, zur Verfahrensvorschrift (4.3), basierend auf den a_{ij} , γ_{ij} und b_j für $\gamma = 1$ aus Tabelle 4.3, sind der Tabelle 4.5 zu entnehmen.

0		1			
1/3	1/3	16/27	-11/27		
1/2	11/54 1/2	0	17/27	-11/4	
	-17/27 11/4 1		0	0	0
\mathcal{A} -Matrix		Γ -Matrix			

Tabelle 4.5: Implementierung des neuen RosRK3.

Zur Abschätzung des Fehlers kann man eine zusätzliche Endstufe \hat{b} einführen, die in der Regel die Ordnung $p - 1$ annimmt. Die Endstufe \hat{b} löst das Butcher-Tableau mit den gleichen Koeffizienten der \mathcal{A} -Matrix und der Γ -Matrix wie die Endstufe b . Verfahren mit zwei Endstufen zur Fehlerabschätzung und/oder Zeitschrittweitensteuerung werden auch eingebettete Verfahren genannt ([8], S. 165 ff.). Die Abschätzung des Fehlers erfolgt schließlich über dem Fehlerterm der Differenz der beiden Endstufen $b - \hat{b} = err$.

Diese eingebetteten Verfahren stellen eine Möglichkeit dar, mit möglichst wenig zusätzlichen Aufwand ein Verfahrenspaar zum RosRK3 zu konstruieren, um den lokalen Fehler des Verfahrens besser zu schätzen.

Für das RosRK3 bedeutet dies:

0				1	1				
1/3	1/3			16/27	-11/27	1			
1/2	0	1/2		0	7/4	-11/4	1		
b	0	0	1		0	0	0		
\hat{b}	\hat{b}_1	\hat{b}_2	\hat{b}_3						

Tabelle 4.6: Eingebettetes RosRK3 mit zusätzlichen Koeffizienten \hat{b}_j .

Die neue Endstufe \hat{b} mit Ordnung eins muss der Ordnungsbedingung

$$\hat{b}_1 + \hat{b}_2 + \hat{b}_3 = 1$$

genügen. Die Ordnungsbedingungen zweiter Ordnung dürfen nicht erfüllt sein. Als Lösung ergibt sich schließlich für \hat{b} :

$$\hat{b}_1 = 1/3, \quad \hat{b}_2 = 1/3 \quad \text{und} \quad \hat{b}_3 = 1/3.$$

Durch Überprüfung kann leicht festgestellt werden, dass die Bedingungen zweiter Ordnung nicht erfüllt sind. Die Bedingung würde lauten:

$$\hat{b}_1 c_1 + \hat{b}_2 c_2 + \hat{b}_3 c_3 = 1/2.$$

Durch einsetzen der Koeffizienten ergibt sich jedoch:

$$1/9 + 1/6 = 5/18 \neq 1/2.$$

Daraus folgt, dass die Koeffizienten \hat{b} nur ein Verfahren von erster Ordnung liefern. Die Implementierungsvorschrift (4.3) für das eingebettete RosRK3 kann der Tabelle 4.7 entnommen werden.

0						
1/3	1/3			1		
1/2	11/54	1/2		16/27	-11/27	
χ	-17/27	11/4	1	0	17/27	-11/4
$\hat{\chi}$	7/27	5/4	1/3		0	0
<i>err</i>	-28/27	0	2/3			
	\mathcal{A} -Matrix			Γ -Matrix		

Tabelle 4.7: Butcher-Tableau der Implementierung des RosRK3 mit zusätzlicher Stufe $\hat{\chi}$.

Die Differenz $w_{n+1} - \hat{w}_{n+1}$ ist die Schätzung des Hauptteils des lokalen Diskretisierungsfehlers des RosRK3 zur Konsistenzordnung $\hat{p} = 1$.

Durch

$$e = \max_{i=1,\dots,m} \frac{|w_{i,n+1} - \hat{w}_{i,n+1}|}{sk_1} \quad (4.8)$$

und

$$sk_1 = atol_i + \max\{|w_{i,n}|, |w_{i,n+1}|\} rtol_i \quad (4.9)$$

wird die neue Schrittweite anhand des lokalen Fehlers bestimmt. Die absolute Fehlertoleranz $atol_i$ und die relative Fehlertoleranz $rtol_i$ bezeichnen die gewünschten Toleranzen, die durch den Benutzer individuell festgelegt werden können.

4.4 Numerische Tests

Die in Kapitel 4.1 und 4.3 vorgestellten Verfahren Ros3-AMF und RosRK3 sollen in diesem Kapitel auf gleichmäßigen bzw. ungleichmäßigen Gittern untersucht werden. Ebenso sollen die zugrunde liegenden expliziten Runge-Kutta Verfahren auf den gleichen Gittern untersucht und mit den beiden Rosenbrock Verfahren verglichen werden.

In diesem Zusammenhang werden dann schließlich die partiell-impliziten Verfahren vorgestellt und auf ungleichmäßigen Gittern untersucht.

4.4.1 Verhalten der Verfahren auf un-/gleichmäßigen Gittern

Die zugehörigen expliziten Runge-Kutta Verfahren zu den vorgestellten impliziten Rosenbrock Verfahren können bestimmt werden, indem man die Jacobi-Matrix J durch eine Nullmatrix ersetzt. Die Runge-Kutta Verfahren sind jeweils von zweiter Ordnung und können der Tabelle 4.8 entnommen werden.

0			0		
2/3	2/3		1/3	1/3	
	1/4 3/4		1/2	0	1/2
RK2-AMF Verfahren				0	0 1
			RK3 Verfahren		

Tabelle 4.8: Runge-Kutta Verfahren zu Ros3-AMF (links) und RosRK3 (rechts).

Die Stabilität wird, wie bereits bekannt, durch die CFL-Zahl bestimmt. In Tabelle 4.9 sind die maximalen CFL-Zahlen für das RK2 und RK3 für unterschiedliche Ortsdiskretisierungsverfahren gegeben, wie zuvor in Kapitel 2.3.1.

	first order upwind	third order upwind	limitierter third order upwind
RK2	0.99	0.87	0.92
RK3	1.25	1.62	1.10

Tabelle 4.9: Maximale CFL-Zahlen für RK2 und RK3.

In den folgenden Untersuchungen werden die Verfahren Ros3-AMF, RK2, RosRK3 und RK3 paarweise untersucht. Dafür sei das Anfangsprofil

$$c(x, 0) = \sin^{50}(\pi x)$$

gegeben. Die Ortsschrittweite über $N = 100$ Gitterzellen für gleichmäßige Gitter ist $h = \frac{1}{100}$. Für ungleichmäßige Gitter wird die Mitte des Gitters gestört, der Rest des Gitters sei gleichmäßig verteilt. Die Ortsschrittweite in der Gittermitte erhält den Wert $h_{50} = \frac{1}{1000}$ und die restlichen $h_j = \frac{1}{101}$. Die Lösung wird nach einer Zeitperiode ($t=1$) untersucht.

Zur Vereinfachung der Rosenbrock Verfahren, wird eine konstante schwach besetzte tridiagonale $N \times N$ Matrix A verwendet. In der Matrix A werden, basierend auf den *first*

order upwind scheme, auf der Diagonalen -1 und auf der unteren Nebendiagonalen 1 eingetragen. Zusätzlich wird jede Zeile j durch die Ortsschrittweite h_j dividiert. So folgt für die Matrix A :

$$A_{N \times N} = \begin{bmatrix} -1/h_1 & 0 & \cdots & 0 & 1/h_1 \\ 1/h_2 & -1/h_2 & \ddots & & 0 \\ 0 & 1/h_3 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1/h_{N-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1/h_N & -1/h_N \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Die Abb. 4.1 zeigt das Verhalten der beiden Rosenbrock Verfahren sowie deren zugehörigen Runge-Kutta Verfahren auf gleichmäßigen Gitter (links) und auf ungleichmäßigen Gitter (rechts) für die limitierte Advektion über dem $\text{Lim}\mathcal{O}3$. In beiden Fällen sei der Zeitschritt τ konstant.

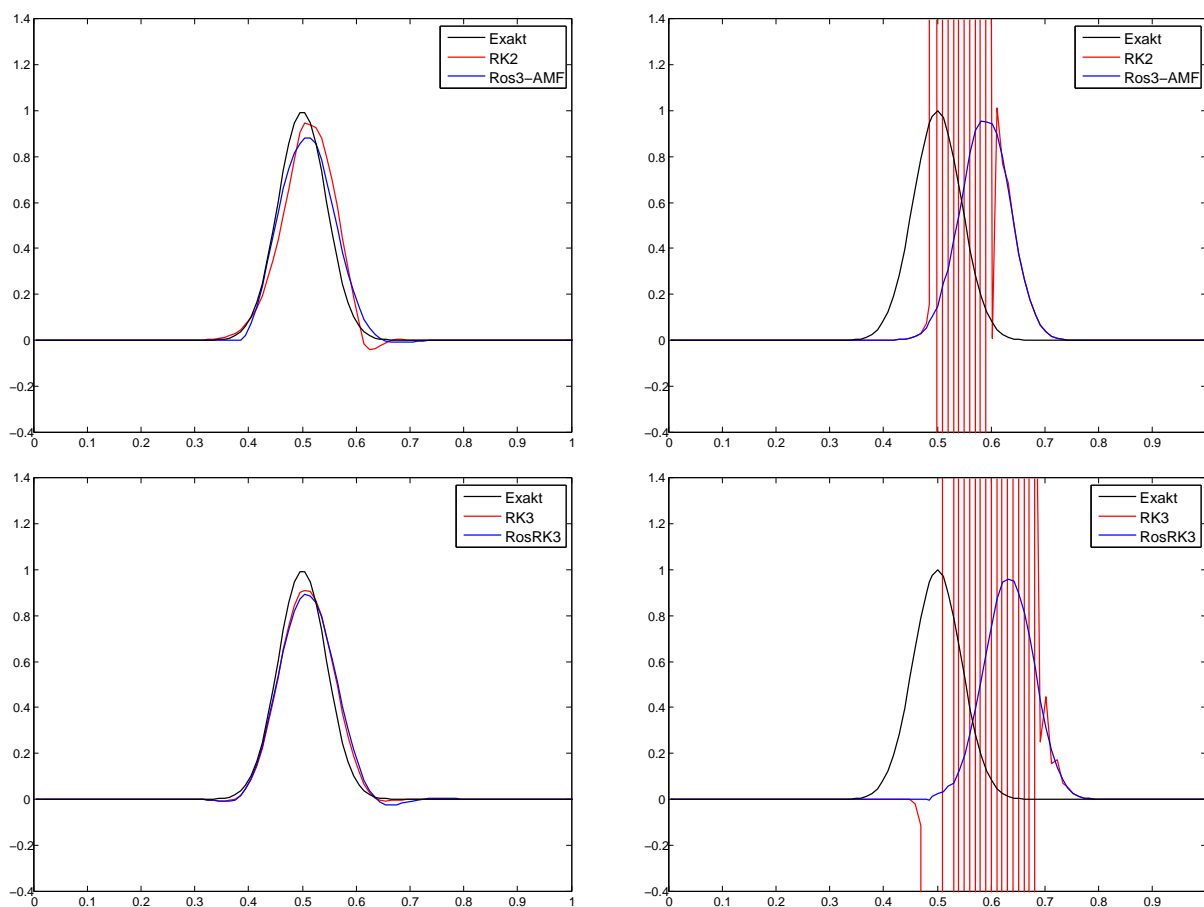


Abbildung 4.1: Limitierte Advektion mit $\text{Lim}\mathcal{O}3$ untersucht auf gleichmäßigen Gitter (rechts) und ungleichmäßigen Gitter (links) für verschiedene Verfahren.

In den oberen beiden Abbildungen wurden die Verfahren Ros3-AMF und RK2 miteinander verglichen. Der Zeitschritt τ beträgt 0.008s, das entspricht, bezogen auf die Gitterweite 1/100, 125 Schritten bei einer CFL-Zahl von 0.8. Beide Verfahren zeigen auf dem gleichmäßigen Gitter (links) stabiles Verhalten. Das RK2 approximiert den Peak des Sinoids besser als das Ros3-AMF, jedoch tritt nach dem Peak eine ungewollte Unterschwingung auf.

Die rechte Abbildung zeigt beide Verfahren nach 10 Zeitschritten auf dem ungleichmäßigen Gitter. Hier ist eindeutig zu sehen, dass das explizite Verfahren schon nach wenigen Zeitschritten instabil ist, da die CFL-Bedingung für kleine Gitterzellen verletzt ist. Erst bei einem Zeitschritt von $\tau = 0.0008s$, das entspricht 1250 Schritten, bleibt das Verfahren stabil (siehe Abb. 4.2, links). Es zeigt sich, dass der Rechenaufwand des expliziten Verfahrens um das zehnfache ansteigt. Das Ros3-AMF hingegen, zeigt überhaupt keine Auffälligkeiten. Hier zeigt sich der große Vorteil von impliziten Verfahren auch bei großen Zeitschrittweiten die Lösung stabil approximieren zu können.

In den unteren Abbildungen wurden die beide Verfahren RosRK3 sowie RK3 miteinander verglichen. Hier ist die CFL-Zahl 1.2 und der Zeitschritt τ entspricht 0.012s, das wiederum würde 83 Schritte entsprechen. Beide Verfahren approximieren die Lösung auf den gleichmäßigen Gitter (links) gut. Das RosRK3 weist leichte Unterschwingungen vor und nach dem Sinoid auf, die deswegen auftreten, weil das Verfahren nicht TVD ist.

Die rechte Abbildung zeigt beide Verfahren auf dem ungleichmäßigen Gitter. Wie in der oberen Abbildung zeigt sich auch hier, dass das explizite RK3 schon nach wenigen Zeitschritten instabil ist. Das RK3 müsste in diesem Fall einen Zeitschritt von $\tau = 0.0012s$ annehmen, das würde 833 Schritte entsprechen, damit das Verfahren stabil läuft (siehe Abb. 4.2, rechts). Hier würde der Rechenaufwand ebenfalls um das zehnfache steigen. Das RosRK3 hingegen approximiert die Lösung ohne Schwierigkeiten. Wie oben schon festgestellt wurde, eignen sich implizite Verfahren besonders gut, wenn ungleichmäßige Gitter vorliegen.

Diese Untersuchungen zeigen, dass explizite Verfahren auf ungleichmäßigen Gitter nur dann geeignet sind, wenn sich der Zeitschritt τ der kleinsten Zelle im Gitter annähern würde. Dieser kleine Zeitschritt verursacht jedoch einen großen Rechenaufwand, der vermieden werden soll. Deswegen scheinen hier implizite Verfahren besser geeignet zu sein. Diese Verfahren sind auch bei großen CFL-Zahlen stabil, jedoch leidet die Genauigkeit, da diese Verfahren nicht TVD sind. Um sowohl explizite wie implizite Verfahren auf ungleichmäßigen Gittern zu nutzen, wird im nächsten Abschnitt eine Möglichkeit durch Kombination von impliziten und expliziten Verfahren vorgestellt.

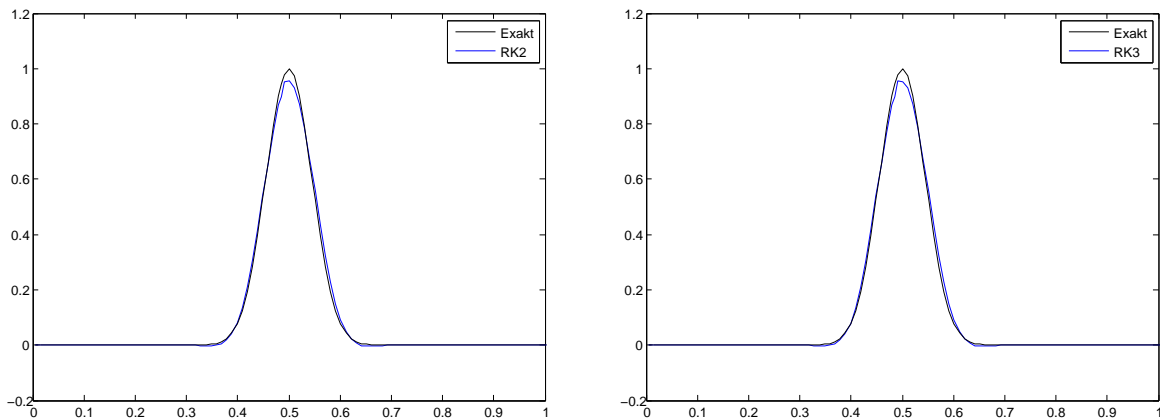


Abbildung 4.2: Explizite Verfahren RK2 und RK3 auf ungleichmäßigen Gitter mit (links) $\tau = 0.0008\text{s}$ und 1250 Schritten, (rechts) $\tau = 0.0012\text{s}$ und 833 Schritten.

4.4.2 Partiiell-implizite Verfahren

Wie im vorherigen Abschnitt festgestellt wurde, haben sowohl explizite wie implizite Verfahren Vor- und Nachteile. Um die Vorteile beider Verfahrenstypen in einem Verfahren nutzen zu können, kann man explizite und implizite Verfahren kombinieren.

Eine Möglichkeit dieser Kombination ist unter dem Begriff der IMEX-Verfahren bekannt. Das sind Verfahren, die den steifen Anteil vom nicht steifen Anteil des Problems trennen und anschließend beide Anteile separat berechnen. So wird der Steife Anteil implizit und der nicht steife Anteil explizit behandelt. Das führt dazu, dass z.B. Speicherprobleme durch vollbesetzte Jacobi-Matrizen umgangen werden oder die Implementierung des Verfahrens vereinfacht werden kann ([12] S. 380-420).

Eine andere Möglichkeit zur Kombination von impliziten und expliziten Verfahren ergibt sich aus den Rosenbrock W -Verfahren, die beliebige Matrizen verwenden. So kann z.B. durch eine partiell besetzte Jacobi-Matrix der steife vom nicht steifen Anteil getrennt werden. Diese Vorgehensweise nennt man auch partiell-implizit.

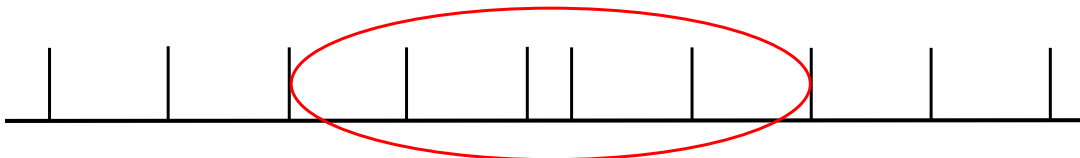


Abbildung 4.3: Beispiel eines gestörten Gitters im 1D. Der implizit zu berechnende Bereich ist rot markiert.

Die Idee für diese partiell-impliziten Verfahren, basiert auf der Überlegung gleichmäßige Gitter mit gestörten (ungleichmäßigen) Bereichen über einen "großen" konstanten Zeit-

schritt τ stabil approximieren zu können.

Der gestörte Bereich eines Gitters wird auch als "small grid cell problem" bezeichnet. Darunter fallen die so genannten "cut cells" Verfahren, bei denen Hindernisse in einem regulären kartesischen Gitter durch "angeschnittene Zellen" berücksichtigt werden. Aber auch andere Probleme fallen darunter, wie Polsingularitäten in sphärischen Koordinaten oder auch vertikal gestreckte Gitter. Ein Beispiel eines gestörten Bereiches in einem eindimensionalen Gitter ist in Abbildung 4.3 dargestellt.

Die zuvor eingeführten Rosenbrock Verfahren Ros3-AMF und RosRK3 sollen über den partiell-impliziten Ansatz untersucht werden. Als partiell-implizites Verfahren müssen beide den Ordnungsbedingungen für Rosenbrock W -Verfahren genügen. Wie bereits bekannt besitzen das RosRK3 und Ros3-AMF die Ordnung zwei, siehe Kapitel 4.2 und 4.3. Es soll im folgenden untersucht werden, welches der beiden Verfahren für Langzeitstudien besser geeignet zu sein scheint.

Für die partiell-impliziten Verfahren ist die obige Matrix A (4.10) und der Stencil des impliziten Bereiches besonders wichtig. Die Matrix A wird so modifiziert, dass nur noch Einträge des Stencil vorhanden sind, siehe (4.11). In den folgenden Untersuchungen wurde ein minimaler Stencil von 3 Gitterzellen gewählt. Dieser besteht aus der "cut cell" x_k selbst und jeweils einer Gitterzelle davor und danach (vergleiche Abb. 4.3).

$$\tilde{A}_{N \times N} = \begin{bmatrix} \ddots & & \dots & & \dots & 0 \\ \ddots & 0 & & & & \\ & 0 & -1/h_{k-1} & & & \vdots \\ \vdots & & 1/h_k & -1/h_k & & \\ & & & 1/h_{k+1} & -1/h_{k+1} & \vdots \\ \vdots & & & & 1/h_{k+2} & 0 \\ & & & & & 0 & \ddots \\ 0 & \dots & & & \dots & & \ddots \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

Die folgenden Untersuchungen sollen zeigen wie sich die Lösung des nicht limitierten *third order upwind schemes* und der Limiter LimO3 und LDLR über ein ungleichmäßiges Gitter mit den beiden partiell-impliziten Verfahren Ros3-AMF und RosRK3 verhalten. Zu diesem Zweck werden die Verfahren über das gleiche Anfangswertprofil (Sinoid) untersucht, wie oben bereits angegeben wurde.

Das ungleichmäßige Gitter mit $N = 100$ Zellen wird in der Mitte des Gitters wieder gestört, der Rest des Gitters sei gleichmäßig verteilt. Die Ortsschrittweite in der Gittermitte nehme den Wert $h_{50} = \frac{1}{1000}$ an und die restlichen $h_j = \frac{1}{101}$. Die CFL-Zahl und der Zeitschritt sind bei allen Untersuchungen konstant mit $\text{CFL} = 0.8$ und $\tau = 0.008\text{s}$ beim Ros3-AMF und mit $\text{CFL} = 1$ und $\tau = 0.01\text{s}$ beim RosRK3.

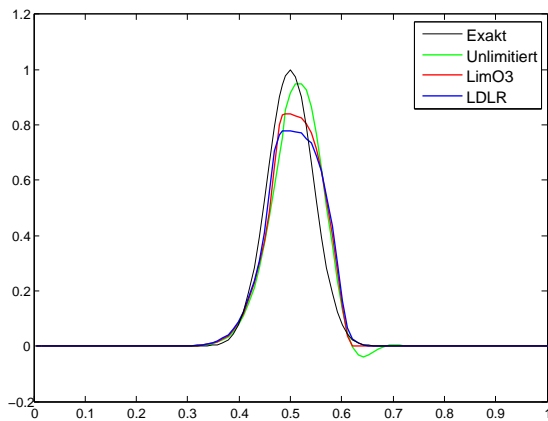
In Abbildung 4.4 wurden Ros3-AMF (oben) und RosRK3 (unten) nach einer und zehn Zeitperioden untersucht. Beim Ros3-AMF (a) ist ersichtlich, dass die Limiter die Lösung gut approximieren. Das nicht limitierte *third order upwind scheme* dagegen nicht. Das nicht limitierte Verfahren weist die gleichen Oszillationen auf, wie in Abbildung 4.1. Das legt die Vermutung nahe, dass das Ros3-AMF als partiell-implizites Verfahren nicht besonders geeignet zu sein scheint. Die Lösung des LimO3 verletzt die Symmetrie (vergleiche Kapitel 3.3).

Auch nach $t = 10$ Zeitperioden (b) ist ersichtlich, dass das Ros3-AMF für diese Art von Verwendung wenig geeignet zu sein scheint. Zwar approximieren die Limiter die Lösung stabil, jedoch ist die Instabilität beim nicht limitierten *third order upwind* deutlich zu erkennen. Die Instabilität ließe sich vermutlich durch Verkleinerung des Zeitschrittes verhindern. Jedoch ist das nicht das Ziel der partiell-impliziten Verfahren, da nur "große" Zeitschritte verwendet werden sollen. .

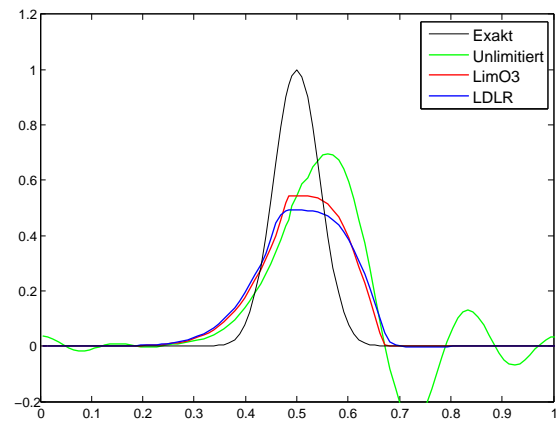
Die Untersuchung des RosRK3 (unten) ergibt, dass obwohl für den nicht limitierten *third order upwind* keine Positivität garantiert wird, die Oszillationen im Gegensatz zum Ros3-AMF die Stabilität des Verfahrens, im Laufe der Zeit, nicht beeinträchtigen.

In beiden Abbildungen (c) und (d) werden die Lösungen der Limiter LimO3 und LDLR ohne Schwierigkeiten approximiert. Als Fazit lässt sich sagen, dass das RosRK3 als partiell-implizites Verfahren mit "großen" Zeitschritten sehr wohl geeignet zu sein scheint. Damit scheint das Ziel dieser Diplomarbeit, numerische Verfahren höherer Ordnung zu entwickeln bzw. finden, die eine stabile Lösung auf ungleichmäßigen Gittern approximieren, erreicht zu sein.

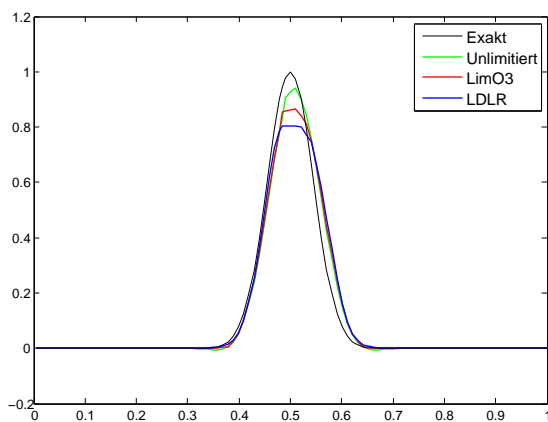
Mit einer maximalen CFL-Zahl von 1.2 ist zumindest für den minimalen Stencil von drei Zellen die Stabilität des Verfahrens gewährleistet. Daher liegt die Vermutung nahe, dass durch einen größeren Stencil, um die kleinen Gitterzellen, eine noch größere CFL-Zahl gewählt werden kann. Inwiefern dadurch die Genauigkeit der Lösung beeinflusst wird, lässt sich durch weiterführende Untersuchungen herausfinden.



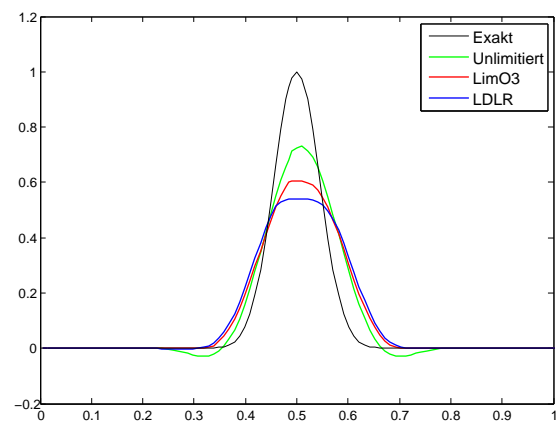
(a) Ros3-AMF nach $t = 1$



(b) Ros3-AMF nach $t = 10$



(c) RosRK3 nach $t = 1$



(d) RosRK3 nach $t = 10$

Abbildung 4.4: Partiell-implizites Ros3-AMF (oben) mit $\tau = 0.008s$ und RosRK3 (unten) mit $\tau = 0.01s$ über limitiertem und nicht limitiertem Profil mit gestörter Zelle.

Kapitel 5

ASAM

ASAM ist ein numerischer Solver für die Simulation atmosphärischer Strömungen auf unterschiedlichen Skalen und Gittern, wobei die Anwendungsskala von Simulationen auf der Sphäre bis zur Umströmung einzelner Gebäudegruppen reicht. ASAM steht für **All Scale Atmospheric Model**.

Diesem Modell liegen die kompressiblen Eulerschen Gleichungen (5.1) zugrunde, [14]. Diese werden in einem Eulerschen System gelöst.

Die Gleichungen sind definiert durch

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} \circ \mathbf{v}) &= -\nabla p - \rho g - 2\Omega \times (\rho \mathbf{v}), \\
 \frac{\partial \rho \theta}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} \theta) &= Q_\theta \quad \text{mit} \\
 p &= \rho R \theta (p/p_0)^\kappa \quad \text{oder} \\
 p &= \left(\frac{R\theta}{p_0^\kappa} \right)^{\frac{1}{1-\kappa}},
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

mit ρ der Dichte, p der Druck, \mathbf{v} dem Geschwindigkeitsvektor, g der Erdanziehungskraft und θ der potentiellen Temperatur. Die rotmarkierten Teile der Gleichungen markieren den Teil, in dem die lineare Advektionsgleichung zum tragen kommt.

ASAM wurde zunächst für die CFD Simulation (*Computational Fluid Dynamics*) in der Umgebung von Gebäuden entworfen, wobei die Hindernisse über ein kartesisches Gitter durch einen "cut cell" Ansatz konstruiert wurden (Abb. 5.1, links). Dieser Ansatz wurde schließlich auf andere Gitter, wie bspw. die Sphäre (Abb. 5.1, rechts), erweitert.

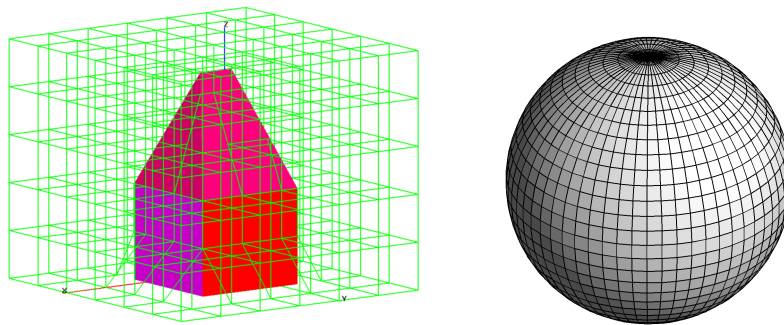


Abbildung 5.1: Umgebung eines Gebäudes (links) und Gitter auf dem Globus (rechts).

Wegen der in diesem Kapitel eingeführten impliziten Zeitintegrationsverfahren gibt es keine Stabilitätsprobleme auf kleinen Gitterzellen resultierend aus "cut cells" oder Zellen im Bereich des Pols.

ASAM setzt voraus, dass physikalische Prozesse vorschriftsmäßig als zeitunabhängige Prozesse im Bezug auf die Modellvariablen definiert werden und unabhängig vom Zeitschritt sind. Der ASAM-Code kann zum Testen neuer numerischen Methoden, aber auch für Prozessstudien auf unterschiedlichen Gittern benutzt werden. Beispiele hierfür sind Wirbelerzeugung in Straßenschluchten, "dry bubble" Experimente usw.

Für weitere Informationen steht die Internetseite <http://asam.tropos.de> zur Verfügung. In diesem Kapitel wird kurz auf die Implementierung der Limiter und der Integrationsverfahren sowie auf eine abgespeckte MatLab-Implementierung eingegangen. Schließlich werden im "dry bubble" Experiment der Einfluss der verschiedenen Limiter auf der erhaltenen Lösung untersucht.

5.1 Implementierung

Das ASAM ist in der Programmiersprache Fortran 90 implementiert. Fortran ist die Ursprache aller algorithmisch orientierten wissenschaftlichen Programmiersprachen. Der Name Fortran kommt von *Formula Translation*. Es ist eine prozedurale Programmiersprache, die seit der Version Fortran 90 auch objektorientiert ist. Sie wird insbesondere für numerische Berechnungen verwendet.

Die in dieser Diplomarbeit vorgestellten Verfahren sowie Limiter wurden im ASAM implementiert. Zur Vereinfachung des späteren Aufrufs des Programms wurden die Verfahren sowie die Limiter in so genannten **case**-Umgebungen implementiert. So kann jedes Verfahren sowie Limiter je nach Bedarf einzeln aufgerufen werden. Die **case**-Umgebung

hat folgendes Aussehen:

```

<Name des Konstrukts> select case ( <case-Ausdruck> )
    case (<case-Fall 1>) <Name des case-Konstrukts>
        Anweisungsblock 1
    case (<case-Fall 2>) <Name des case-Konstrukts>
        Anweisungsblock 2
    case ...
        ...
    case default
        Alternativer Anweisungsblock falls keiner der oben abgefragten
        Faelle zutreffen sollte.
end select <Name des Konstrukts>

```

Die Untersuchungen im nächsten Abschnitt 5.2 wurden mit einer kleineren in MatLab realisierten ASAM Version durchgeführt. Die kleinere Version beinhaltet nur das Testbeispiel der Warmluftblase auf gleichmäßigen Gittern. Auf die Untersuchung von "small grid cell problems" wurde verzichtet, weil die Ergebnisse analog zu den hier vorgestellten Ergebnissen sind.

5.2 Numerische Tests

Mit der kleineren MatLab-Version des ASAMs soll getestet werden, welcher der Limiter (Koren, LimO3 und LDLR) am besten das nicht limitierte *third order upwind scheme* wiedergibt. Diese Untersuchung erfolgt über das Testbeispiel der Warmluftblase (*dry bubble*). In einer neutral geschichteten Atmosphäre ($\theta = const.$) wird ein Gebiet erhöhter Temperatur eingebracht, welches den selben Druck hat, wie die Umgebungsluft. Diese Luft ist daher leichter und muss nach oben steigen. Gleichzeitig wird das Luftpaket einer horizontalen Verdriftung unterworfen. Das Gebiet erhöhter Temperatur wird durch folgende Störung

$$\theta' = 2 \cos^2 \left(\frac{\pi L}{2} \right), \quad (5.2)$$

$$L = \sqrt{\left(\frac{x - x_c}{x_r} \right)^2 + \left(\frac{z - z_c}{z_r} \right)^2}, \quad (5.3)$$

mit

$$x_c = 10\text{km}, \quad z_c = 2\text{km} \quad \text{und} \quad x_r = z_r = 2\text{km}$$

und den Anfangswerten

$$\theta_0 = 300K \quad \text{und} \quad \mathbf{v} = (20; 0)^T$$

definiert. Dieses Testbeispiel wurde der Arbeit [18], Mendes-Numez und Carrol, entnommen. Die Warmluftblase wird in einen Gebiet mit den horizontalen Grenzen $x \in [-10\text{km}, 10\text{km}]$ und den vertikalen Grenzen $z \in [0\text{km}, 10\text{km}]$ über ein 100×50 Gitter mit den Ortsschrittweiten $h_x = h_z = 200\text{m}$ untersucht. Die horizontale Verdriftung beträgt 20m/s und ist so gewählt, dass die Warmluftblase nach 1.000s durch periodische Randbedingungen wieder am Ausgangspunkt ankommt.

Die Abbildungen 5.2 zeigen den zeitlichen Verlauf der Warmluftblase ohne Verwendung eines Limiters zu verschiedenen Zeitpunkten. Das Anfangsprofil (a) der Warmluftblase ist im Bezug auf die vertikale Achse des Gebietes symmetrisch und das Ausgangsmaximum der potentiellen Temperatur liegt auf der Symmetrielinie. Da die Randbedingungen periodisch sind, erhält die Lösung (f) die Symmetrie aufrecht und das Maximum der potentiellen Temperatur liegt in der Nähe der Symmetrielinie. Durch Verwendung anderer Rosenbrock Verfahren ist die Symmetrie bei horizontaler Verdriftung nicht zwingendermaßen gegeben. Woran dies liegt, wurde bisher noch nicht geklärt.

	$\tau = 5\text{s}$	$\tau = 10\text{s}$
Unlimitiert	301.3748	301.3751
Koren	301.0188	301.0614
LDLR	301.3748	301.3751
limO3	301.3751	301.3759

Tabelle 5.1: Maximale potentielle Temperatur der Blase nach $t = 1000\text{s}$.

In Abbildung 5.3 wurden die Limiter Koren, LDLR und LimO3 für den Testfall der Warmluftblase nach $t = 1000\text{s}$ untersucht und gegenüber gestellt.

Die Abbildung (a) zeigt die Lösung der Warmluftblase über den Limiter nach Koren. Obwohl die Symmetrie erhalten bleibt, haben sich zwei lokale Maxima der potentiellen Temperatur in einer gewissen Entfernung von der Symmetrielinie gebildet. Diese Entwicklung von zwei Extrema tritt lediglich nur bei TVD-Limitern auf. So auch bei den in Kapitel 3 erwähnten van Leer, MC und Superbee Limitern.

Der Verlust des Maximums der potentiellen Temperatur gegenüber dem Testfall ohne Limitierung liegt hier bei ca. 25.9% , siehe auch Tabelle 5.1. Dieser Verlust kann noch annehmbar sein, weil das Verfahren die Erhaltungssätze erfüllt und damit die Wärmeenergie

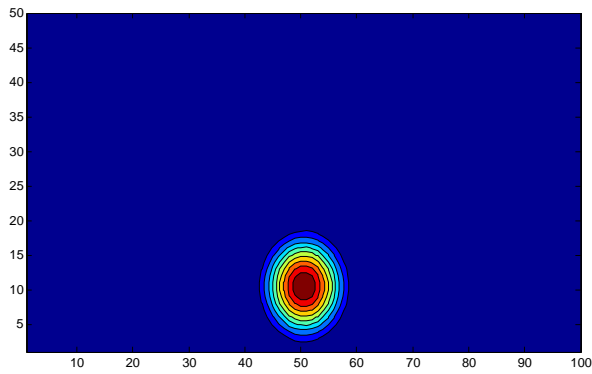
in der Warmluftblase neu verteilt, aber nicht zerstreut. Dieser Effekt wurde auch in [14] erläutert und es wurden Überlegungen angestellt, diesem Effekt entgegen zu wirken.

Aus diesen Überlegungen heraus, wurden in Kapitel 3 die logarithmische Rekonstruktion (LDLR) und der logarithmische Limiter (LimO3) betrachtet. Es soll nun gezeigt werden, dass durch diese beiden Möglichkeiten der Effekt von zwei Extrema verhindert und somit der Testfall ohne Limitierung (Abb. 5.2 (f)) angenähert werden kann.

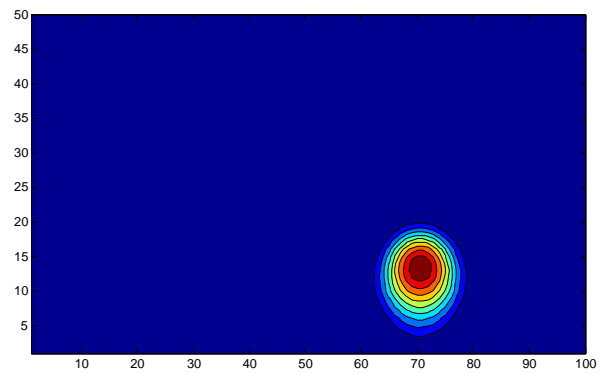
In Abb. 5.3 (b) wird der LDLR verwendet. Hier ist sehr schön zu sehen, dass beim LDLR keine zwei Maxima links und rechts von der Symmetrielinie auftreten, sondern nur ein Maximum an der Symmetrielinie, wie beim Testfall ohne Limitierung (Abb. 5.2 (f)). Auch der Vergleich des Maximums der potentiellen Temperatur zeigt, dass kein Verlust der potentiellen Temperatur auftritt.

Der LimO3, siehe Abb. 5.3 (c), zeigt ebenfalls keine zwei Maxima, sondern nähert sich dem Testfall ohne Limitierung an. Ein Vergleich der potentiellen Temperatur (Tabelle 5.1) mit den nicht limitierten Testfall ergibt sogar einen leichten Temperaturgewinn von 0.02%. Es scheint, dass der LimO3 durch den leichten Zuwachs der potentiellen Temperatur besser ist als der LDLR.

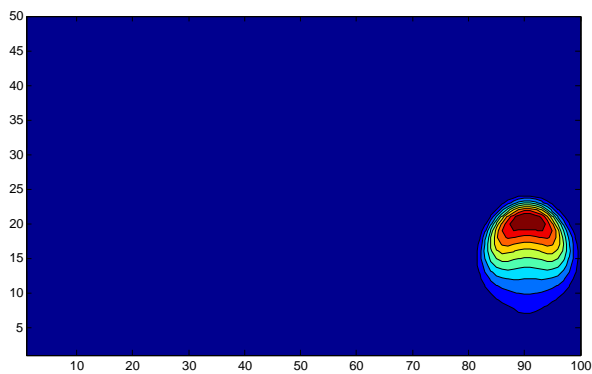
An diesem Beispiel ist jedoch nicht unbedingt zu erkennen, warum eine Limitierung der Advektion gewünscht wird. Erst an einem Beispiel mit einer feuchten Warmluftblase oder beim Transport von Wolken zeigt sich, warum eine Limitierung so wichtig ist. Durch das numerische lösen können beim nicht limitieren negative Luftfechtigkeiten auftreten, die in der Natur nicht vorkommen und dadurch werden die gesamten Ergebnisse verfälscht.



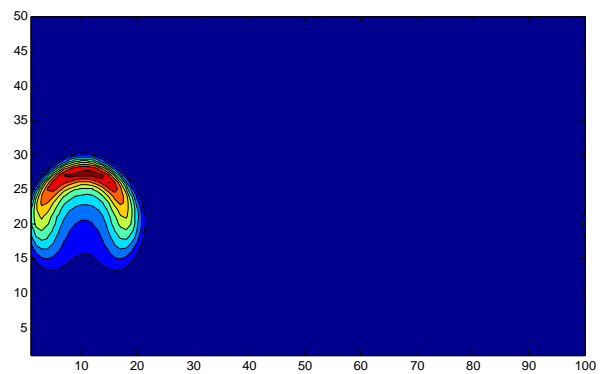
(a) 0 Sekunden



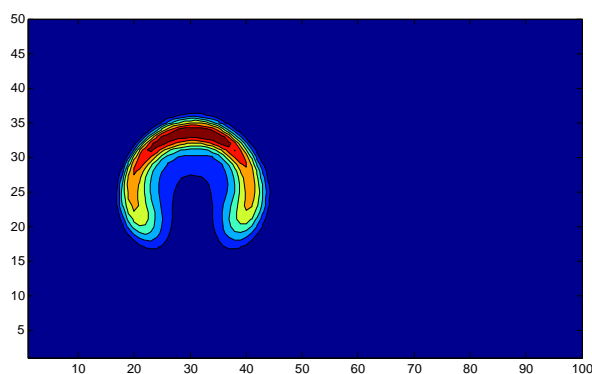
(b) 200 Sekunden



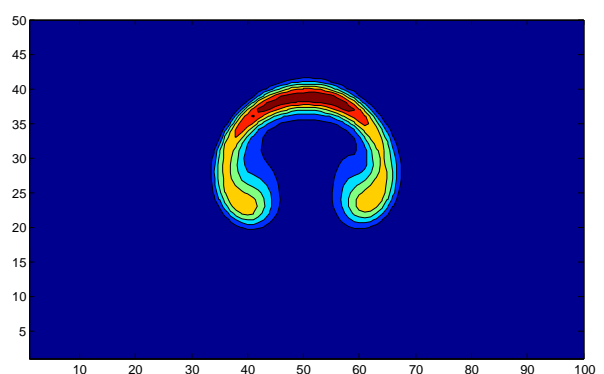
(c) 400 Sekunden



(d) 600 Sekunden

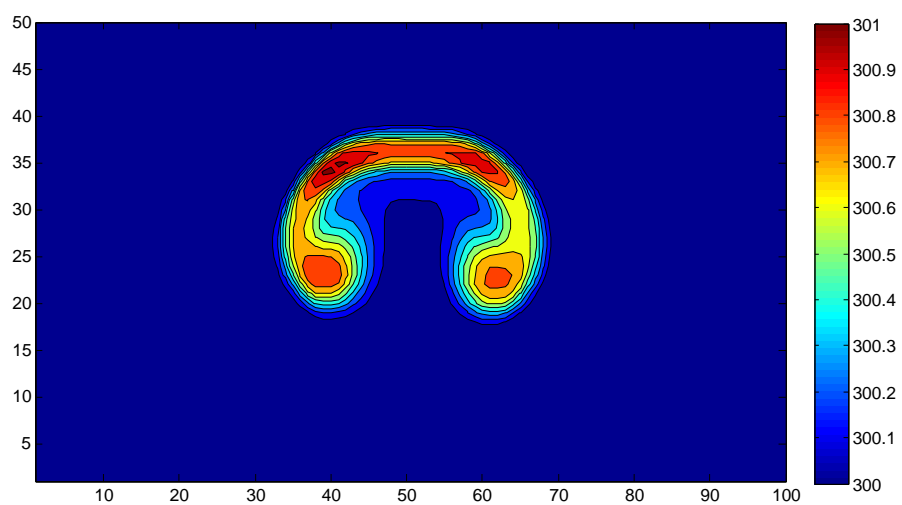


(e) 800 Sekunden

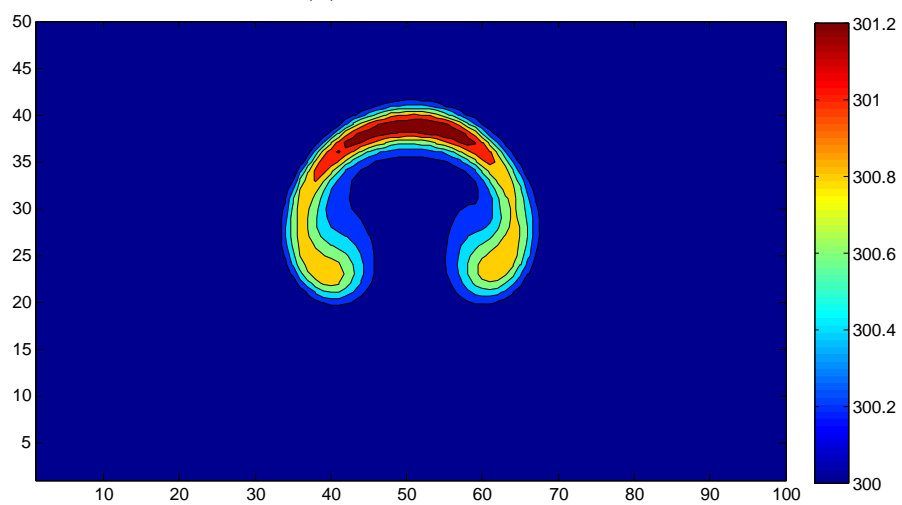


(f) 1000 Sekunden

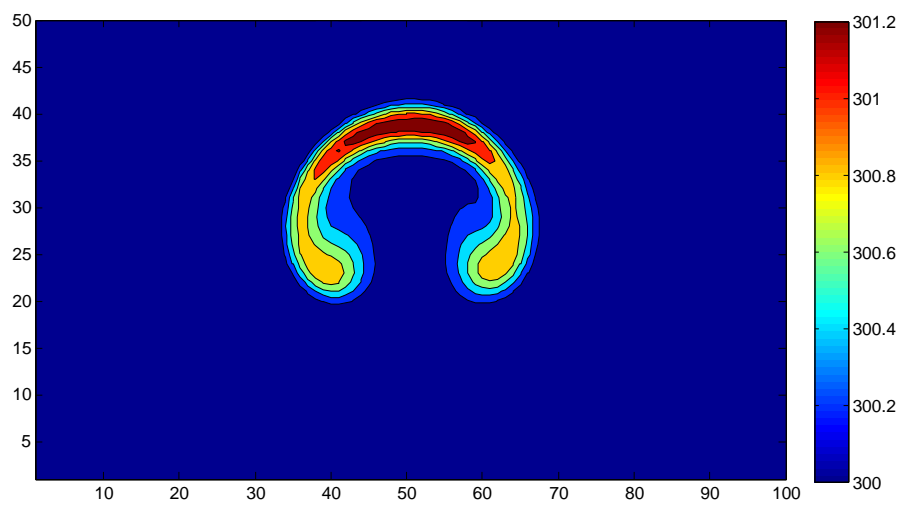
Abbildung 5.2: Verlauf der Warmluftblase über 1000s mit $\tau = 5s$ und $CFL=1/2$ für verschiedene Zeitpunkte.



(a) Limiter nach Koren



(b) LDLR



(c) LimO3

Abbildung 5.3: Warmluftblase über verschiedenen Limiter untersucht. $\tau = 5s$ und $CFL=1/2$.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Diplomarbeit war eine Auswahl geeigneter numerischer Verfahren zu treffen, welche eine stabile Integration der linearen Advektionsgleichung auf ungleichmäßigen Gittern mit "großen" Zeitschritten ermöglichen.

Dazu wurde zunächst die lineare Advektionsgleichung vorgestellt und deren exakte Lösung betrachtet. Im ersten großen Kapitel wurde die Diskretisierung der Advektionsgleichung im Ort und der Zeit für variable Gitter diskutiert. In diesem Zusammenhang wurden räumliche Diskretisierungen über polynomiale Rekonstruktionsansätze mittels finiter Volumen Methode hergeleitet. Unerwünschte Effekte der Diskretisierungsverfahren, wie das auftreten von Oszillationen und die Verletzung der Positivitätsforderung, wurden betrachtet. Diese negativen Effekte können durch Anwendung einer Limitierungstechnik verhindert werden. In diesem Zusammenhang wurde auch der klassische TVD-Limiter, der Limiter nach Koren, diskutiert.

Anschließend wurden explizite Zeitintegrationsverfahren, die so genannten expliziten Runge-Kutta Verfahren, vorgestellt. Zunächst wurde die allgemeine Verfahrensvorschrift dieser Verfahren erläutert und einige Verfahren präsentiert. Im folgenden wurde auf die Ordnung bzw. Güte der expliziten Runge-Kutta Verfahren eingegangen, sowie Ordnungsbedingungen angegeben. Schließlich wurden die Zeit und Ortsdiskretisierung zu einem voll diskretisierten Verfahren zusammengeführt, indem der Zeitschritt durch die CFL-Bedingung begrenzt wurde.

In Kapitel 3 wurden ein weiterer Rekonstruktionsansatz sowie ein weiterer Limiter betrachtet. Zunächst wurde ein logarithmischer Rekonstruktionsansatz vorgestellt. Dieser Ansatz ist auch bekannt als lokaler doppellogarithmischer Rekonstruktionsansatz (LDLR). Dieser wurde so konstruiert, dass keine Limiter benötigt werden.

In diesem Zusammenhang wurde ein weiterer "logarithmischer" Limiter eingeführt. Der Lim $\mathcal{O}3$ ist zum einen eine modifizierte Version des Limiters nach Koren und zum

anderen, angelehnt an den LDLR, eine Art logarithmischer Limiter, der jedoch auf die Berechnung von Logarithmen verzichtet. Angesetzt an einen Rekonstruktionsansatz dritter Ordnung bleibt die Ordnung durch den LimO3 erhalten, was wiederum den LimO3 besonders macht.

Das 4. Kapitel beschäftigte sich ausschließlich mit impliziten Zeitintegrationsverfahren, insbesondere wurde hier auf die Familie der linear-impliziten Rosenbrock Verfahren eingegangen. Zunächst wurde allgemein erläutert, was Rosenbrock Verfahren sind. In diesem Zusammenhang wurde auf die Ordnungsbedingungen sowie das Rosenbrock Verfahren Ros3-AMF eingegangen. Diese Rosenbrock Verfahren gehen jedoch von einer exakten Berechnung der Jacobi-Matrix aus. Eine weitere Verfahrensklasse dieser Verfahren sind die Rosenbrock W-Verfahren. W-Verfahren verwenden unter Beachtung weiterer Ordnungsbedingungen, die die Stabilität gewährleisten, eine beliebige Approximation der Jacobi-Matrix. Die Bestimmung der Ordnung dieser Art von Verfahren kann durch die angegebenen Ordnungsbedingungen erfolgen.

Die Konstruktion eines neuen Rosenbrock W-Verfahrens war der Hauptteil dieses Kapitels. Dieses neue RosRK3 wurde speziell für die Verwendung von beliebigen Matrizen konstruiert und basiert auf den zugrunde liegenden expliziten Runge-Kutta Verfahren RK3, welches aktuell in Wettervorhersagemodellen Anwendung findet. Das RosRK3 wurde so entwickelt, dass es sowohl mit exakter als auch mit inexakter Jacobi-Matrix jeweils von zweiter Ordnung ist. Durch die Konstruktion einer zusätzlichen Endstufe niedriger Ordnung, wurde eine Schätzung für den Hauptteil des lokalen Fehlers oder zur Schrittweitensteuerung entwickelt.

Schließlich wurde das Verhalten der vorgestellten Rosenbrock Verfahren und deren zugrunde liegenden expliziten Runge-Kutta Verfahren auf gleichmäßigen und ungleichmäßigen Gittern untersucht. Dabei ist festgestellt worden, dass die expliziten Verfahren mit einem großen Zeitschritt auf ungleichmäßigen Gittern instabil werden. Deswegen wurde schließlich die Idee der partiell-impliziten Rosenbrock Verfahren erläutert. Der Kern dieser Verfahren ist eine partiell besetzte Jacobi-Matrix, die nur in Bereichen von Gitterstörungen bzw. in der Umgebung von *cut cells* Einträge aufweist. Daraus resultiert ein Verfahren, dass nur in der Umgebung von Störungen bzw. *cut cells* implizit und sonst explizit integriert und auch bei "großen" Zeitschritten stabil läuft.

Schließlich wurde im 5. Kapitel der numerische Solver ASAM vorgestellt und die, in dieser Diplomarbeit, besprochenen Verfahren sowie die behandelten Limiter implementiert. Anhand des Beispiel einer Warmluftblase wurden die Limiter, unter Beachtung der potentiellen Temperatur, untersucht. Dabei wurde auf die Bildung von zwei Maxima der potentiellen Temperatur, die bei TVD-Limitern auftritt, hingewiesen und gezeigt, dass der Effekt bei der logarithmischen Rekonstruktion (LDLR) und beim LimO3 nicht auftritt.

Anhang A

Abkürzungsverzeichnis

Sofern nicht anders deklariert gelten folgende Zeichen/Symbole:

a_{ij}, b_i, c_i	Runge-Kutta Koeffizienten
W_i	Zwischenstufe des RK-Verfahren
$\alpha_{ij}, \gamma_{ij}, b_i, \chi_i$	Rosenbrock Koeffizienten
k_i	Zwischenstufe der Rosenbrock Verfahren
S, I	Iterationsmatrix und Einheitsmatrix
J, A	Exakte und inexakte Jacobi-Matrix
a_0, a_1, a_2	Interpolationskoeffizienten
ξ	Interpolationsvariable
q, p	Interploationspolynome
N	Anzahl der Gitterzellen
f	Fluss an Zellgrenze
F	Vektor der Flüsse
h	Ortsschritt, Gitterlänge
i, j, k	Zählvariable
θ	Anstiegsverhältnis
t	Zeitkoordinate
τ	Zeitschritt
u	Advektionsgeschwindigkeit, Wellengeschwindigkeit
w	Vektor, resultierend aus der Ortsdiskretisierung einer kontinuierlichen Variablen
w'	Erste Ableitung

x	Ortskoordinaten
μ	Mischverhältnis
$\phi, \hat{\phi}$	Limiterfunktionen
r_j	Rekonstruktionsansatz des LDLR
d_1, d_2	Links- bzw. rechtsseitiger Anstieg in Zelle x_j
a, b, c, d	Koeffizienten des LDLR
TOL	Toleranz des LDLR
q	Exponent der lokalen Variation des LDLR
η^\pm	Logarithmische Funktion des LDLR
η	Indikatorfunktion des Lim $\mathcal{O}3$
CFL	Courant-Zahl $CFL = u\tau/h$
Ω	Volumenintervall

Anhang B

Mathematica-Code

Im folgenden ist der Mathematica-Code zur Bestimmung der Koeffizienten des RosRK3 angegeben. Zunächst wird die Implementierung und Definition der Parameter sowie der Ordnungsbedingungen vorgenommen.

(* Definition *) (* ERK *)

$$mA = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a[1,0] & 0 & 0 \\ a[2,0] & a[2,1] & 0 \end{pmatrix}; \quad mA2 = \begin{pmatrix} a[1,0] & 0 \\ a[2,0] & a[2,1] \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} a[1] \\ a[2] \end{pmatrix} = mA2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad mC = \begin{pmatrix} c[0] & c[1] & c[2] \end{pmatrix}$$

(* Semi-impliziter Integrator *)

$$mB = \begin{pmatrix} b[] & 0 & 0 \\ b[1,0] & b[] & 0 \\ b[2,0] & b[2,1] & b[] \end{pmatrix}; \quad mB2 = \begin{pmatrix} b[1,0] & 0 \\ b[2,0] & b[2,1] \end{pmatrix};$$

$$\text{invB} = \text{Inverse}[mB]; \quad \begin{pmatrix} b[0] \\ b[1] \\ b[2] \end{pmatrix} = mB \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$mG = \begin{pmatrix} g[1,0] & g[1,1] \\ g[2,0] & g[2,1] \end{pmatrix} = mA2 + mB2; \quad \begin{pmatrix} g[0] \\ g[1] \\ g[2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ a[1] \\ a[2] \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b[0] \\ b[1] \\ b[2] \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b[] \\ b[] \\ b[] \end{pmatrix};$$

Die Bestimmung der Koeffizienten erfolgt unter Beachtung der Ordnungsbedingungen für Rosenbrock Verfahren mit exakter Jacobi-Matrix.

(* Ordnungsbedingungen *)

$$\begin{aligned} \text{condA1} & : \sum_{i=0}^2 c[i] == 1; \\ \text{condB2} & : \sum_{i=1}^2 c[i] * g[i] == 1/2 * (1 - 2 * b[]); \\ \text{condC3} & : \sum_{i=1}^2 c[i] * a[i]^2 == 1/3; \\ \text{condD3} & : \sum_{i=2}^2 \sum_{j=1}^{i-1} c[i] * g[i, j] * g[j] == 1/6 * (1 - 6 * b[] + 6 * b[]^2); \\ \text{condE4} & : \sum_{i=1}^2 c[i] * a[i]^3 == 1/4; \\ \text{condF4} & : \sum_{i=2}^2 \sum_{j=1}^{i-1} c[i] * g[i, j] * a[j]^2 == 1/12 * (1 - 4 * b[]); \end{aligned}$$

(* Implementierung der Koeffizienten *)

$$\begin{aligned} \text{matAlpha} & = \text{matA} . \text{invB}; \\ \text{matBeta} & = (1/b[]) * \text{IdentityMatrix}[3] - \text{Inverse}[\text{matB}]; \\ \text{matChi} & = \text{matC} . \text{invB}; \end{aligned}$$

(* Implementierung ERK *)

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a[1,0] & 0 & 0 \\ a[2,0] & a[2,1] & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c[0] & c[1] & c[2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Bei der Überprüfung der Ordnungsbedingungen ergibt sich schließlich, dass die Koeffizienten $b[1,0]$, $b[2,0]$ und $b[2,1]$ durch die Bedingungen condB2 , condD3 und condF4 bestimmt werden müssen.

(* Bestimmen der Koeffizienten *)

```
sol = Flatten[FullSimplify[Solve[{condB2, condD3, condF4}, {b[1, 0], b[2, 0], b[2, 1]}]]];
```

```
SolAlpha = FullSimplify[matAlpha/.sol];
```

```
SolBeta = FullSimplify[matBeta/.sol];
```

```
SolChi = FullSimplify[matChi/.sol];
```

```
b[] = γ;
```

(* Output *)

```
Print["α =", MatrixForm[SolAlpha]]
```

```
Print["β =", MatrixForm[SolBeta]]
```

```
Print["χ =", MatrixForm[SolChi]]
```

Die so bestimmten Koeffizienten werden schließlich noch auf die Ordnungsbedingungen der W-Verfahren überprüft.

(* Ordnungsbedingungen W-Verfahren*)

$$\text{condAW1} : \sum_{i=0}^2 c[i] == 1;$$

$$\text{condBW2} : \sum_{i=1}^2 c[i] * a[i] == 1/2;$$

$$\text{condCW2} : \sum_{i=0}^2 c[i] * b[i] == 0;$$

$$\text{condDW3} : \sum_{i=0}^2 c[i] * a[i]^2 == 1/3;$$

$$\text{condEW3} : \sum_{i=0}^2 \sum_{j=1}^{i-1} c[i] * a[i, j] * a[j] == 1/6;$$

$$\text{condFW3} : \sum_{i=0}^2 \sum_{j=1}^{i-1} c[i] * a[i, j] * b[j] == 0;$$

$$\text{condGW3} : \sum_{i=0}^2 \sum_{j=1}^{i-1} c[i] * b[i, j] * a[j] == 0;$$

$$\text{condHW3} : \sum_{i=0}^2 c[i] * b[i]^2 == 0;$$

Anhang C

Abbildungsverzeichnis

2.1	Linienmethode im 1D-Ortsgitter.	7
2.2	Gebietszerlegung im Detail	8
2.3	Diskretisierung im Ort	9
2.4	Stencil des Upwind-Verfahrens erster Ordnung.	10
2.5	Stencil des Central-Verfahrens zweiter Ordnung.	12
2.6	Stencil des Upwind-Verfahrens dritter Ordnung.	13
2.7	Steigungsrate	16
2.8	TVD Region für gleichmäßige Gitter	17
2.9	Profile gelöst mit RK2a über <i>third order upwind-biased scheme</i> für verschiedene CFL-Zahlen	23
2.10	Verschiedene Ortsdiskretisierungen berechnet über RK2a und $CFL = 1/2$	26
2.11	Profile mit limitierten <i>third order upwind-biased scheme</i> für verschiedene RK-Verfahren und $CFL = 1/2$	27
3.1	Vergleich der Limiter nach Koren und LimO3. Oben: mit RK2a, Verfahren zweiter Ordnung und $CFL = 0.8$, $t = 20$ und $N = 400$. Unten: mit SORK, Verfahren dritter Ordnung und $CFL = 0.8$, $t = 20$ und $N = 400$	39
3.2	Vergleich des LDLR und des LimO3 mit unterschiedlichen Schrittweiten, berechnet über SORK. Oben: mit $CFL = 0.8$, $t = 20$ und $N = 200$. Unten: mit $CFL = 0.8$, $t = 20$ und $N = 400$	40
3.3	Advektionsgleichung über ein Rechteck-Profil (links) und ein Sinus-Profil (rechts) als Anfangswerte. Ergebnis wurde zum Zeitpunkt $t = 20$ mit $CFL = 0.8$ und $N=200$ für verschiedene Radien r der asymptotischen Region berechnet.	42

3.4	Verschiedene Limiter im Vergleich. Berechnet über $t = 20$ mit RK3a, CFL = 0.8 und $N = 100$	42
4.1	Limitierte Advektion mit LimO3 untersucht auf gleichmäßigen Gitter (rechts) und ungleichmäßigen Gitter (links) für verschiedene Verfahren.	54
4.2	Explizite Verfahren RK2 und RK3 auf ungleichmäßigen Gitter mit (links) $\tau = 0.0008s$ und 1250 Schritten, (rechts) $\tau = 0.0012s$ und 833 Schritten. . .	56
4.3	Beispiel eines gestörten Gitters im 1D. Der implizit zu berechnende Bereich ist rot markiert.	56
4.4	Partiell-implizites Ros3-AMF (oben) mit $\tau = 0.008s$ und RosRK3 (unten) mit $\tau = 0.01s$ über limitiertem und nicht limitierten Profil mit gestörter Zelle.	59
5.1	Umgebung eines Gebäudes (links) und Gitter auf dem Globus (rechts). . .	61
5.2	Verlauf der Warmluftblase über 1000s mit $\tau = 5s$ und CFL=1/2 für verschiedene Zeitpunkte.	65
5.3	Warmluftblase über verschiedenen Limiter untersucht. $\tau = 5s$ und CFL=1/2.	66

Anhang D

Tabellenverzeichnis

2.1	Butcher-Tableaus	20
2.2	explizite Runge-Kutta Verfahren	20
2.3	Ordnungsbedingungen expliziter Runge-Kutta Verfahren	21
2.4	Max. CFL-Zahl für ausgewählte explizite Runge-Kutta Verfahren	24
4.1	Ordnungsbedingungen der Rosenbrock Verfahren bis zur Ordnung 4.	45
4.2	Ordnungsbedingungen der Rosenbrock W -Verfahren bis zur Ordnung 3.	48
4.3	Allgemeine Koeffizienten des RosRK3.	50
4.4	Koeffizienten des RosRK3 für $\gamma = 1$	50
4.5	Implementierung des neuen RosRK3.	50
4.6	Eingebettetes RosRK3 mit zusätzlichen Koeffizienten \hat{b}_j	51
4.7	Butcher-Tableau der Implementierung des RosRK3 mit zusätzlicher Stufe $\hat{\chi}$	52
4.8	Runge-Kutta Verfahren zu Ros3-AMF (links) und RosRK3 (rechts).	53
4.9	Maximale CFL-Zahlen für RK2 und RK3.	53
5.1	Maximale potentielle Temperatur der Blase nach $t = 1000$ s.	63

Anhang E

Literaturverzeichnis

- [1] R. Artebrant and H.J. Schroll. Limiter-Free Third Order Logarithmic Reconstruction. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(1):359–381, 2006.
- [2] M. Berger, M.J. Aftosmis, and S.M. Murman. Analysis of Slope Limiters on Irregular Grids. *AIAA paper 2005-0490*, in: *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2005.
- [3] COSMO-Model. Homepage: <http://cosmo-model.cscs.ch/>.
- [4] R. Courant, K. Friedrich, and H. Lewy. Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische Annalen*, 100(1):32–74, 1928.
- [5] L. Ferracina and M.N. Spijker. An Extension and Analysis of the Shu-Osher Representation of Runge-Kutta Methods. *Math. Comp.*, 74(249):201–219, 11 2004.
- [6] A.D. Freed and I.S. Iskovitz. Development and Applications of a Rosenbrock Integrator. *NASA Technical Memorandum*, (4709), 1996.
- [7] F.F. Grinstein, C. Fureby, and C.R. DeVore. On MILES based on flux-limiting algorithms. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 47:1043–1051, 2005.
- [8] E. Hairer, S.P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems*, volume 8. Springer Verlag, 1987.
- [9] E. Hairer and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*, volume 14. Springer Verlag, 1991.
- [10] W.H. Hundsdorfer, B. Koren, M. van Loon, and J.G. Verwer. A positive finite-difference advection scheme. *CWI*, 1991.

-
- [11] W.H. Hundsdorfer, B. Koren, M. van Loon, and J.G. Verwer. A positive finite-difference advection scheme applied on locally refined grids. *CWI*, (NM-R9309), April 1993.
- [12] W.H. Hundsdorfer and J.G. Verwer. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer-Verlag Berlin, 2003.
- [13] G.S. Jiang and C.W. Shu. Efficient Implementation of Weigthed ENO Schemes. *J. Comp. Phys.*, 126(0130):202–228, 1996.
- [14] R. Klein. Asymptotics, structure, and integration of sound-proof atmospheric flow equations. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, series 23:161–195, 2009.
- [15] B. Koren. A robust upwind discretisation method for advection, diffusion and source terms. *CWI*, (NM-R9308), 1993.
- [16] D. Lanser, J.G. Blom, and J.G. Verwer. Time integration of the shallow water equations in spherical geometry. *J. Comput. Phys.*, 171:1–21, 2001.
- [17] A. Marquina. local piecewise hyberbolic reconstruction of numerical fluxes for non-linear conservation laws. *SIAM J. Sci. Comp.*, 15(4):892–915, 1994.
- [18] L.R. Mendez-Numez and J.J. Carroll. Application of the MacCormack scheme to atmospheric nonhydrostatic models. *Monthly Weather Review*, 122:984–1000, 1994.
- [19] H.H. Rosenbrock. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. *Comput. J.*, 5:329–330, 1963.
- [20] T. Steihaug and A. Wolfbrandt. An attempt to avoid exact Jacobian and nonlinear equations in the numerical solution of stiff differential equations. *Math. Comp.*, 33:521–534, 1979.
- [21] M. Čada and M. Torrilhon. Compact third order limiter functions of Finite-Volume-Methods. *Research Report ETH*, (12-2008), May 2008.
- [22] L.J. Wicker and W.C. Skamarock. Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *AMS Monthly Weather Review*, 130:2088–2097, 2002.
- [23] WRF-Model. Homepage: <http://www.wrf-model.org/index.php>.
- [24] R. Zvan, P.A. Forsyth, and K. Vetzal. Robust Numerical Methods for PDE Models of Asian Options. *J. Comp. Fin.*, 1998.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt habe. Alle verwendeten Hilfsmittel und Quellen sind im Literaturverzeichnis vollständig aufgeführt und die aus den benutzten Quellen wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungsbehörde zur Erlangung eines akademischen Grades vorgelegt.

Carsten Niebuhr

Leipzig, den 07. Dezember 2009

Danksagung

Die Diplomarbeit ist die interessanteste Zeit des Studiums. So kann man endlich sehen, ob sich die letzten Jahre des Studierens wirklich gelohnt haben. Allerdings wäre es niemals so weit gekommen, wenn meine Eltern mich nicht während des gesamten Studiums unterstützt hätten. Dafür möchte ich meinen Eltern über alles danken.

Ich möchte mich an dieser Stelle auch bei all denen bedanken, die mich bei der Anfertigung meiner Diplomarbeit so tatkräftig unterstützt haben. Besonders möchte ich mich aber bei meine Betreuern Dr. Oswald Knoth sowie Prof. Bernd Engelmann bedanken, die mir aufgrund ihrer langjährigen Erfahrungen eine sehr große Hilfe waren. Auch bei den Helfern für die vielen Stunden des Korrekturlesens möchte ich mich herzlichst bedanken. Ohne euch wäre es nie zu dieser Diplomarbeit gekommen. Zuallerletzt auch noch vielen Dank an meine Arbeitskollegen, die mir immer mit Rat und Tat zur Seite standen.