

Übungen zu Meteorologische Modellierung Teil 'Grundlagen der Numerik'

1. Diskretisierung in der Zeit: Die Evolutionsgleichung

Kurzzusammenfassung

Zur Erprobung der Verfahren zur zeitlichen Diskretisierung betrachten wir die lineare Differentialgleichung

$$(1) \quad \frac{\partial T}{\partial t} = -aT + F \quad (\text{Evolutionsgleichung, engl. decay equation})$$

Sie stellt die zeitliche Entwicklung einer Größe T bedingt durch einen konstanten Antrieb F und einer linearen Dämpfung mit der Zeitkonstanten $\tau = 1/a$ dar. Diese Gleichung kann analytisch gelöst werden: $T(t) = F/a + \Delta T \exp(-a t)$. Wobei F/a die Gleichgewichtslösung und ΔT die Abweichung des Anfangswerts $T_0 (=T(t_0))$ von der stationären Lösung sind.

Nun soll die Evolutionsgleichung, also die zeitliche Entwicklung von T , numerisch gelöst werden. Hierzu wird ein Anfangszeitpunkt t_0 und ein Anfangswert von T ($T(t_0)$; Anfangswertproblem) festgelegt. Die kontinuierlichen Funktionen, t und T , werden durch diskrete Werte ersetzt. Der Lauf der Zeit ergibt sich so, durch das fortwährende hinzufügen von diskreten Zeitschritten Δt , zu einer Folge von Zeitpunkten $t_n = t_0 + n\Delta t$. Die zeitliche Entwicklung von T ergibt sich aus den Werten von T zu den jeweiligen Zeiten ($t_0 + n\Delta t$).

Nun gilt es noch die Ableitung ($\partial T/\partial t$) zu diskretisieren, d.h. durch Werte T_n zu den diskreten Zeitpunkten t_n darzustellen, um so eine Bestimmungsgleichung für $T(t_n + n\Delta t) = T_{n+1}$ zum nächsten Zeitpunkt t_{n+1} zu erhalten. Hier gibt es unterschiedliche Möglichkeiten.

a) *Einschrittverfahren (engl. two level schemes):*

Einschrittverfahren nutzen nur die Informationen des aktuellen (t) und des nächsten ($t + \Delta t$) Zeitpunkts. Die zeitliche Ableitung durch die Werte zu diesen Zeitpunkten ausgedrückt (ein Schritt; oder zwei Zeitebenen). Ausgangspunkt ist eine Taylorentwicklung:

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \frac{\partial T}{\partial t} \Delta t + \dots$$

hieraus ergibt sich direkt die Diskretisierung von $\partial T/\partial t$ durch

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T(t + \Delta t) - T(t)}{\Delta t} = \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t}$$

und man erhält aus (1) eine Bestimmungsgleichung für T_{n+1} :

$$T_{n+1} = T_n + \Delta t (F - aT)$$

wobei es für die Berechnung von aT unterschiedliche Wahlmöglichkeiten von T gibt:

- Euler Verfahren (explizit)

aT wird zum bekannten Zeitpunkt n ausgewertet:

$$T_{n+1} = T_n + \Delta t (F - aT_n)$$

- Implizites Verfahren

aT wird zum unbekanntem Zeitpunkt $n+1$ ausgewertet:

$$T_{n+1} = T_n + \Delta t (F - aT_{n+1}) \Rightarrow T_{n+1} = (T_n + \Delta t F) / (1 + \Delta t a)$$

- Crank-Nicolson Verfahren

aT wird zu einem Zeitpunkt zwischen n und $n+1$ ausgewertet (gewichtetes Mittel):

$$T_{n+1} = T_n + \Delta t (F - a(g T_n + (1-g) T_{n+1})) \Rightarrow T_{n+1} = (T_n + \Delta t (F - a g T_n)) / (1 + \Delta t a(1-g))$$

mit $0 \leq g \leq 1$. Je nach Wahl des Gewichts g wird hier zwischen den Extremen explizit ($g=1$) und implizit ($g=0$) gerechnet. Bemerkenswert ist, dass sich für $g=0.5$ der Verfahrensfehler im Vergleich zum expliziten und impliziten Verfahren um eine Ordnung verbessert, d.h. zu $O(2)$ ($=O(\Delta t^2)$) wird (s. unten).

- Das Runge-Kutta-Verfahren (4. Ordnung)

Zwischen den Zeitpunkten t und $t+\Delta t$ werden mehrere („künstliche“) Stützstellen zur Berechnung der rechten Seite verwendet. Aus einer Taylor Entwicklung höherer (4.) Ordnung der analytischen Lösung (hier für $F=0!$) ergibt sich:

$$T(t+\Delta t) = (1 - a\Delta t + a^2\Delta t^2/2 - a^3\Delta t^3/6 + a^4\Delta t^4/24) T(t)$$

$$\Rightarrow T(t+\Delta t) = T(t) + 1/6 (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

mit

$$K_1 = -a\Delta t T(t)$$

$$K_2 = -a\Delta t (T(t) + K_1/2)$$

$$K_3 = -a\Delta t (T(t) + K_2/2)$$

$$K_4 = -a\Delta t (T(t) + K_3)$$

Oder allgemein für $\partial T / \partial t = f(t, T)$:

$$K_1 = \Delta t f(t_0, T_0)$$

$$K_2 = \Delta t f(t_0 + \Delta t/2, T_0 + K_1/2)$$

$$K_3 = \Delta t f(t_0 + \Delta t/2, T_0 + K_2/2)$$

$$K_4 = \Delta t f(t_0 + \Delta t, T_0 + K_3)$$

und, wie oben, $T(t+\Delta t) = T(t) + 1/6 (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$. Es muss also 4 mal die rechte Seite ausgewertet werden (für die jeweiligen $T + \Delta T$).

b) Zwei- und Mehrschritt Verfahren

Bei den Zweischritt Verfahren (three level schemes) wird zusätzlich die Information des vorhergehenden Zeitpunkts ($t-\Delta t$) verwendet (Dies kann auch durch Informationen weiterer Zeitebenen erweitert werden \Rightarrow Mehrschritt Verfahren).

Beispiel: Leapfrog Verfahren

das Leapfrog Verfahren wird/wurde sehr häufig in numerischen Wetter/Klima Modellen zur Berechnung des adiabatischen Teils verwendet (z.B. PUMA, ECHAM). Wie sich allerdings herausstellt, ist es nur für konservative Prozesse (z.B. Advektion, Schwingungen, etc.) ein geeignetes (stabiles) Verfahren, nicht aber für die dissipative Evolutionsgleichung. Trotzdem soll es hier schon einmal vorgestellt werden. Ausgangspunkt sind die Taylor Entwicklungen:

$$(a) T(t+\Delta t) = T(t) + \frac{\partial T}{\partial t} \Delta t + \dots$$

$$(b) T(t-\Delta t) = T(t) - \frac{\partial T}{\partial t} \Delta t + \dots$$

mit (a) - (b) folgt als Diskretisierung von $\partial T/\partial t$:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T(t+\Delta t) - T(t-\Delta t)}{2\Delta t} = \frac{T_{n+1} - T_{n-1}}{2\Delta t}$$

für Evolutionsgleichung folgt dann

$$\frac{T(t+\Delta t) - T(t-\Delta t)}{2\Delta t} = -aT(t) + F$$

Wie zu sehen ist, werden hier die zwei Zeitebenen ($t-\Delta t$) und (t) zur Berechnung des neuen Wertes $T(t+\Delta t)$ benötigt. Bei Zweischrittverfahren kommt es typischerweise zum Auftreten einer 'künstlichen' Lösung, dem sog. computational Mode, neben der gewünschten 'Physikalischen'. Beim der Verwendung des Leapfrog Verfahrens für die Evolutionsgleichung, ist dieser Computational Mode immer instabil und macht das Verfahren ungeeignet (s. Vorlesung).

Natürlich gibt es noch eine Reihe anderer Ein- und Mehrschrittverfahren. Genannt seien hier das Lax-Wendroff und das Adams-Bashford Verfahren, die gelegentlich in der Meteorologie Anwendung finden. Das Adams-Bashford Verfahren löst die Gleichung $\partial T/\partial t = f(T)$ durch

$$T(t+\Delta t) = T(t) + \Delta t(3f(T(t)) - f(T(t-\Delta t)))/2$$

Die Zeitebene $t-\Delta t$ wird hier also zur Berechnung der Steigung verwendet (das Differential jedoch nur mit t und $t+\Delta t$). Auch beim Adams-Bashford Verfahren kommt es zum auftreten eines computational Mode, der jedoch bei der Evolutionsgleichung (bei geeignet kleinem Zeitschritt) mit der Zeit (stark) gedämpft wird. Damit ist das Adams-Bashford auch für dissipative Systeme einsetzbar.

Da in Zweischrittverfahren immer zwei bekannte Zeitebenen ($t-\Delta t$ und t) benötigt werden, muss man sich, wenn nur der Anfangswert ($t=0$) bekannt ist, den Wert bei $t=\Delta t$ auf andere Art beschaffen. Typischerweise geschieht dies mit einem Einschrittverfahren. Um diesen Wert möglichst genau zu erhalten wird hierbei häufig das Einschrittverfahren mehrmals hintereinander mit einem kleineren Zeitschritt angewendet. Ein ungenauer Wert begünstigt (verstärkt) den computational Mode.

c) Konsistenz, Verfahrensfehler, Konvergenz, Stabilität und Zeitschrittwahl

Die Fähigkeit eines numerischen Verfahrens die exakte (analytische) Lösung einer Differentialgleichung zu reproduzieren hängt von mehreren Faktoren ab. Zunächst einmal muss die Diskretisierung konsistent sein, d.h. sie muss gegen das Differential selbst konvergieren (Konsistenz):

$$\frac{dT}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\| \frac{\Delta T}{\Delta t} \right\|$$

Der Verfahrensfehler ergibt sich aus dem Vergleich zwischen der numerischen und der analytischen Lösung. Setzt man die analytische Lösung in die Differenzgleichung ein, so wird diese i.a. nicht erfüllt. Die Potenz von Δt im Residuum gibt die Ordnung des Fehlers.

Beispiel explizites Verfahren (mit $F=0!$):

$$Err = T(t) (\exp(-a\Delta t) - 1 + a\Delta t) / \Delta t \quad \text{mit } T(t) = \Delta T \exp(-at)$$

mit Taylor Entwicklung für $\exp(-a\Delta t)$

$$\Rightarrow Err = T(t) (a^2 \Delta t / 2 + \dots)$$

Hier ist also der Verfahrensfehler 1. Ordnung (in Δt).

Im Allgemeinen wird ein Verfahren als konvergent bezeichnet, wenn der Fehler (d.h. die Abweichung von exakten Wert T_A) für kleine Δt gegen 0 konvergiert, d.h.:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \|T(t) - T_A(t)\| = 0$$

als Norm kommen u.a. der sog. RMS (Root Mean Square) Fehler (Wurzel aus der Summe der quadratischen Abweichungen) und die Maximumsnorm (maximale Abweichung) in Frage. In unserem Beispiel ist Konsistenz gegeben.

Die Stabilität eines Verfahrens ist sowohl durch das Verfahren selbst als auch (in vielen Fällen; bei Verwendung expliziter Verfahren) durch die Zeitschrittwahl gegeben. Ein Verfahren ist dann instabil, wenn die numerische und die analytische (richtige) Lösung zeitlich divergieren, d.h. Abweichung zwischen der wirklichen Lösung und dem berechneten Wert mit der Zeit immer größer werden. Zwar sind, bis auf das Leapfrog Schema, die oben angegebenen Verfahren prinzipiell stabil, da der Fehler für $\Delta t \rightarrow 0$ auch gegen 0 geht, diese Stabilität ist aber nicht unbedingt für alle Zeitschrittlängen Δt gegeben. Im expliziten Schema kann so ein zu großer Zeitschritt zur Instabilität führen:

$$T(t+\Delta t) = T(t) - \Delta t a T(t) = T(t) (1 - \Delta t a) \quad (F=0, T(t) = \Delta T \exp(-at))$$

Führt man diese Operation nun mehrmals aus (rechnet also in der Zeit voran), ergibt sich

$$T(t+n\Delta t) = T(t) (1 - \Delta t a)^n$$

Das Verfahren divergiert also für $\Delta t a > 2$. Für $2 > \Delta t a > 1$ ist das Verfahren zwar stabil (die Lösung konvergiert gegen die analytische), jedoch ergibt sich eine +/- Oszillation. Nur für $\Delta t a < 1$ ist die numerische Lösung wirklich 'sinnvoll', d.h. eine maximale Zeitschrittlänge von $1/a$ sollte verwendet werden.

Im impliziten Verfahren gibt es diese Beschränkung für den Zeitschritt nicht, da

$$T(t+\Delta t) = T(t) - \Delta t a T(t+\Delta t) \Rightarrow T(t+\Delta t) = T(t) / (1 + \Delta t a)$$

und $1/(1 + \Delta t a)^n$ für alle Δt gegen 0 (wie verlangt) konvergiert. Es sei jedoch bemerkt, dass die Wahl eines zu langen Zeitschritts in einem an sich stabilen Verfahren zu unsinnigen Ergebnissen führen kann, da die bestimmenden Prozesse auf kleinere Zeiten ablaufen. Generell gilt: je kleiner der Zeitschritt, desto besser (realistischer) die Ergebnisse.

Aufgaben:

1. Löse die Evolutionsgleichung numerisch. Erweitere hierzu das Programm zur analytischen Lösung (gleiche Parameter wie bei der analytischen Lösung). Verwende das explizite Euler Verfahren mit dem Zeitschritt $\Delta t=1$. Schreibe die numerisch bestimmte Zeitreihe heraus ($t=0, \dots, 200\Delta t$) und plote sie zusammen mit der analytischen Lösung.

2. Ermittle experimentell (durch Änderung des Zeitschritts und Verwendung des RMS Fehlers und der Maximumsnorm) die Fehlerordnung des expliziten Verfahren

3. Verwende nun auch das implizite, das Crank-Nicolson, das Runge-Kutta und das Adams-Bashforth Verfahren (gleiche Parameter wie 1). Vergleiche die Genauigkeit der verschiedenen Verfahren bei gleichem Zeitschritt durch die Berechnung der Fehler (RMS und Maximum) und ermittle auch hier experimentell die Fehlerordnung. (Beim Zweischrittverfahren kann die numerische Lösung eines der anderen Verfahren oder die analytische Lösung für den benötigten Zeitpunkt $t=\Delta t$ verwendet werden).

Zusatzaufgabe (optional):

Die Verfahren zur zeitlichen Diskretisierung können natürlich auch für komplexere Gleichungen verwendet werden. Eine sehr bekannte Gleichungssystem ist das Lorenz Modell, das ja u.a. ein low order Modell der atmosphärischen Konvektion ist (Näheres in der Vorlesung Theoretische Meteorologie). Das Modell ist so bekannt, weil es sog. deterministisches Chaos zeigt. Die Gleichungen sind gegeben durch:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\sigma X + \sigma Y$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -XZ + rX - Y$$

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = XY - bZ$$

mit den externen Parametern σ (Prandtl Zahl), r (Rayleigh Zahl) und b (Dämpfung).

Berechne die numerische Lösung des Lorenz Modells und plote den berühmten ‚Schmetterling‘ ($X(t), Y(t), Z(t)$). Klassische Werte der Parameter für das chaotische Verhalten sind dabei $\sigma = 10.$, $r=28.$ und $b=8./3.$ Als Anfangswert kann z.B. $(1,1,1)$ genommen werden. Als Zeitschritt kann ein Wert von $1/100.$ genommen werden, es sollten ungefähr 10000 Zeitschritte gerechnet werden. Bemerkung: Da, wie aus der Theorie bekannt, das Lorenz Modell sehr sensitiv ist, sollte für wissenschaftliche Studien ein möglichst genaues Schema verwendet werden. Dies ist in vielen Fällen das Runge-Kutta Verfahren. Hier kann zunächst auch einmal das explizite Euler Schema ausprobiert werden. Die Variablen sollten in hoher Genauigkeit ($\text{kind}=8$) definiert werden.