3. Einführung in die Methode der finiten Differenzen

Als Einführung in die Methode der finiten Differenzen betrachten wir die eindimensionale Transportgleichung (oder Advektionsgleichung) mit konstanter Strömungsgeschwindigkeit *u*.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \qquad (u = \text{const} > 0)$$
 (3.1)

Wie in Kapitel 2.4 diskutiert wurde hat dieses Problem eine analytische Lösung. Es eignet sich deshalb hervorragend als Testproblem für numerische Schemen.

In diesem Kapitel betrachten wir zuerst zwei einfache numerische Schemen, welche beide zur *Methode der Finiten Differenzen* gehören. Diese Methode basiert auf einer gitterartigen räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der Form

$$x_i = i \Delta x$$

$$\phi_i^n = \phi(x_i, n \Delta t)$$
(3.2)

wobei Δx den Abstand zweier Gitterpunkte, und Δt den Zeitschritt bezeichnen. Der Wert ϕ_i^n soll dabei den den Mittelwert von ϕ in der betrachteten Gitterbox $\left[x_i - \Delta x/2, x_i + \Delta x/2\right]$ beschreiben.

3.1 Das Upstream-Schema

Die Methode der Finiten Differenzen beruht auf der Approximation der partiellen Ableitungen durch Differenzen auf dem rechnerischen Gitter. Ziel des Verfahrens ist ein Iterationsschritt, mit welchem ϕ^{n+1} aus ϕ^n berechnet werden kann. Hier wählen wir für die räumliche Ableitung

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i}^{n} \approx \frac{\phi_{i}^{n} - \phi_{i-1}^{n}}{\Delta x} \tag{3.4}$$

und für die zeitliche Ableitung

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_{i}^{n} \approx \frac{\phi_{i}^{n+1} - \phi_{i}^{n}}{\Delta t} \ . \tag{3.5}$$

Den Zeitschritt (3.5) bezeichnet man als *Euler*- oder *Forward*-Schritt, da er vom bekannten Zeitniveau n vorwärts (in die Zukunft) zeigt. Die räumliche Ableitung (3.4) ist ebenfalls nicht symmetrisch, sondern stromaufwärts verschoben, was mit *Upstream* bezeichnet wird. Die obengenannten Approximationen der Ableitungen durch finite Differenzen sind konsistent, da sie für infinitesimal kleine Gitterweiten Δx und Δt mit den analytischen Definitionen

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}\bigg|_{r,t} := \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\phi(x,t+\Delta t) - \phi(x,t)}{\Delta t}, \qquad \frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{r,t} := \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\phi(x+\Delta x,t) - \phi(x,t)}{\Delta x}$$

übereinstimmen. Setzt man (3.4) und (3.5) in die analytische Gleichung (3.1) ein, so ergibt sich

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} = 0.$$

Die Auflösung nach ϕ_i^{n+1} ergibt das *Upstream-Schema*

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \alpha \left(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n \right) \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{u\Delta t}{\Delta x} , \tag{3.6}$$

wobei α als *Courant-Zahl* bezeichnet wird. Diese Formel kann iterativ benutzt werden, um von einem bekannten Anfangszustand in die Zukunft zu rechnen.

Als Beispiel betrachten wir die Advektion einer "dreieckigen" Anomalie, welche durch

$$\phi_o = \max\left(0, \ 1 - \frac{|x|}{0.3}\right)$$

gegeben ist und in Fig.3.1a durch die gepunktete Linie graphisch dargestellt ist. Um das Problem der lateralen (also seitlichen) Randbedingungen zu eliminieren, wird ein periodisches Gebiet der Länge 1 verwendet. Die weiteren Grössen werden folgendermassen gewählt:

$$u = 1$$
, $\Delta x = 1/20$ und $\Delta t = 1/40$.

Dies ergibt eine Courant-Zahl von $\alpha = 0.5$.

Als Integrationszeit wird die Zeit 1 gewählt (40 Zeitschritte). Nach dieser Zeit reproduziert sich (dank der periodischen Randbedingungen) der Anfangszustand. Die Ergebnisse für das Upstream-Schema werden in Fig.3.1a gezeigt. Die gepunkteten und durchgezogenen Linien stellen die analytische und die numerische Lösung dar. Das Upstream-Schema gibt die Verschiebung der Anomalie qualitativ richtig wieder, verursacht jedoch eine starke Glättung der advektierten Struktur.

Die Wahl der Courant-Zahl bei unserem Test ist willkürlich. In Fig.3.1b wird derselbe Test deshalb mit $\alpha = 1$ bei gleicher Wahl für Δx wiederholt (ergibt 20 Zeitschritte). Für diesen Wert ist die numerische Lösung mit der analytischen identisch. Dies kann anhand von (3.6) nachvollzogen werden. Mit $\alpha = 1$ ergibt sich

$$\phi_i^{n+1} = \phi_{i-1}^n ,$$

womit pro Zeitschritt die ϕ -Werte um genau einen Gitterpunkt nach rechts verschoben werden. Das exzellente Resultat in Fig.3.1b lässt sich jedoch in der Praxis nicht nutzen. Einerseits kennt man bei einem wirklichen Problem die advektive Geschwindigkeit u nicht im voraus, beziehungsweise diese ist nicht konstant. Andererseits wird das Upstream-Schema numerisch instabil für $\alpha > 1$ (siehe Fig.3.1c), womit man nur mit grossem Risiko in der Nähe von $\alpha = 1$ arbeiten kann.

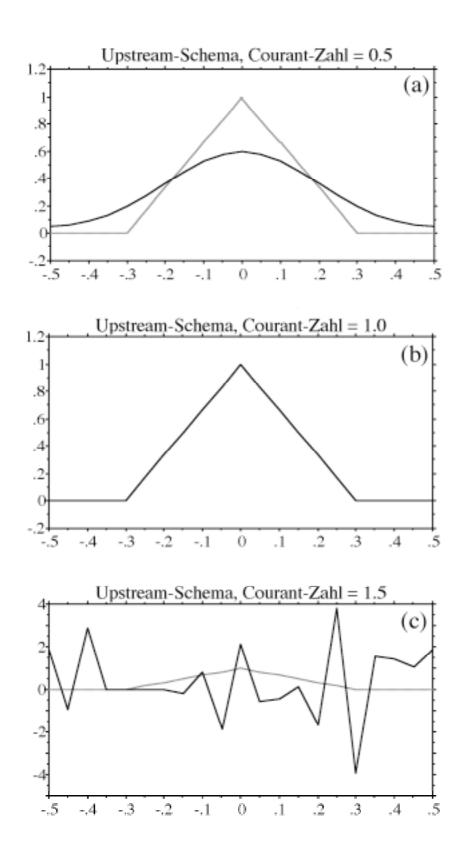


Fig.3.1: Advektionstest mit dem Upstreamschema und drei verschiedenen Courant-Zahlen. Die gezeigten Bilder sind zur Zeit 1, nach welcher sich (infolge der periodischen Randbedingungen) der Anfangszustand (gepunktet) reproduzieren sollte. Diagramm (c) stammt aus einer instabiliten Simulation und ist nach 7 Zeitschritten aufgenommen.

3.2 Das "Leapfrog"-Schema

Die grosse implizite Diffusion des Upstream-Schemas macht letzteres für praktische Zwecke häufig nutzlos. Hier behandeln wir ein Schema, welches in dieser Beziehung besser ist. Es beruht auf der Verwendung von räumlich und zeitlich zentrierten Diskretisierungen der partiellen Ableitungen, nämlich

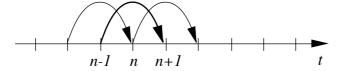
$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_{i}^{n} \approx \frac{\phi_{i}^{n+1} - \phi_{i}^{n-1}}{2 \Delta t} , \qquad (3.7)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i}^{n} \approx \frac{\phi_{i+1}^{n} - \phi_{i-1}^{n}}{2 \Delta x} \ . \tag{3.8}$$

Einsetzen von (3.7-8) in (3.1) und Auflösen nach ϕ_i^{n+1} ergibt

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^{n-1} - \alpha \left(\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n \right) \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{u \Delta t}{\Delta x}$$
 (3.9)

Im Gegensatz zum Upstream-Schema werden hier auch Terme zur Zeit n-1 benötigt. Man spricht in diesem Zusammenhang von einem 2-Schritt-Verfahren, welches mit drei Zeitniveaus arbeitet. Die Bezeichnung "Leapfrog" (Bockspringen) ist auf den speziellen Zeitschritt zurückzuführen. Dies wird anhand einer einfachen Skizze klar:



Um das Verfahren zu starten sind nicht nur die Werte zum Zeitpunkt n = 0 nötig, sondern auch zum Zeitpunkt n = 1. Die ersteren sind durch die Anfangsbedingungen gegeben, während die neuen Werte bei n = 1 meistens durch ein getrenntes Verfahren ausgerechnet werden müssen.

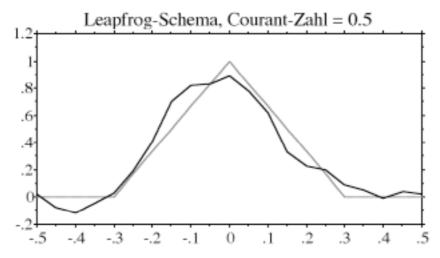


Fig.3.2: Advektionstest für das Leapfrog-Schema.

Der zum "Leapfrog"-Schema gehörige Advektionstest in Fig.3.2 zeigt, wie dieses Schema die anfängliche Amplitude der Anomlie recht gut bewahren kann. Andererseits sieht die Lösung etwas "rumpelig" aus. Trotzdem ist das Leapfrog-Schema, vor allem in Folge seiner Einfachheit und des vergleichsweise kleinen Rechenaufwandes, ein sehr beliebtes Verfahren.

3.3 Die Ordnung eines numerischen Schemas

Die im Vergleich mit Fig.3.1a reduzierte Glättung (auch Dämpfung genannt) des Leapfrog-Schemas ist bedingt durch die bessere Approximation der partiellen Ableitungen. Dies kann anhand einer Taylor-Entwicklung analysiert werden. Der räumliche Verlauf von ϕ kann damit beschrieben werden durch

$$\phi_{i\pm 1} = \phi(x_i \pm \Delta x) = \phi_i \pm \phi_i' \Delta x + \phi_i'' \frac{\Delta x^2}{2} \pm \phi_i'' \frac{\Delta x^3}{3!} + \phi_i^{(iv)} \frac{\Delta x^4}{4!} \pm \phi_i^{(v)} \frac{\Delta x^5}{5!} + O(\Delta x^6)$$
(3.10)

wobei ϕ'_i die erste Ableitung von ϕ nach x an der Stelle x_i bezeichnet. Der letzte Term drückt aus, dass noch Terme der Ordnung Δx^6 (und höherer Ordnung) folgen werden. Die Auflösung von (3.10 mit Minus-Zeichen) nach ϕ'_i ergibt

$$\phi_i' = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} + \phi_i'' \frac{\Delta x}{2} - \phi''' \frac{\Delta x^2}{3!} + \phi_i^{(iv)} \frac{\Delta x^3}{4!} - \phi_i^{(v)} \frac{\Delta x^4}{5!} + O(\Delta x^5)$$
(3.11a)

Der erste Term auf der rechten Seite ist die diskretisierte Form der Ableitung, welche beim Upstream-Schritt verwendet wurde. Damit lässt sich der räumlich Fehler F des Upstream-Schemas ermitteln, d.h.

$$\phi_i' = (\phi_i')^{upstream} + F \quad \text{mit} \quad F = \phi_i'' \frac{\Delta x}{2} - \phi''' \frac{\Delta x^2}{3!} + O(\Delta x^3)$$
 (3.11b)

Der Fehler ist erster Ordnung, d.h. der führende Term von F ist proportional zu Δx . Auch der zeitliche Fehler des Forward-Schrittes ist erster Ordnung, weshalb man das ganze Schema als ein *Schema erster Ordnung* bezeichnet.

Um den räumlichen Fehler des zentrierten Schemas (3.9) zu erhalten, muss auch der Term ϕ_{i+1} in eine Taylor-Reihe entwickelt werden. Analog zu (3.11a) ergibt die Auflösung von (3.10 mit + Zeichen) nach ϕ'_i

$$\phi' = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \phi_i'' \frac{\Delta x}{2} - \phi''' \frac{\Delta x^2}{3!} - \phi_i^{(iv)} \frac{\Delta x^3}{4!} - \phi_i^{(v)} \frac{\Delta x^4}{5!} + O(\Delta x^5) , \qquad (3.12)$$

Bildet man das arithmetische Mittel von (3.11a) und (3.12), so erhält man

$$\phi_i' = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} - \phi''' \frac{\Delta x^2}{3!} - \phi_i^{(v)} \frac{\Delta x^4}{5!} + O(\Delta x^6).$$
 (3.13a)

Der erste Term auf der rechten Seite ist die zentrierte finite Differenz im Raum, welche somit gemäss

$$\phi' = (\phi')^{zentriert} + F \quad \text{mit} \quad F = -\phi''' \frac{\Delta x^2}{3!} + O(\Delta x^4) , \qquad (3.13b)$$

eine Approximation zweiter Ordnung darstellt.

Das stark diffusive Verhalten des Upstream-Schemas (Fig.3.1a) ist eine direkte Folge seiner niedrigen Ordnung. Das Vergleichsweise "eckige" Resultat des Leapfrog-Schemas ist andererseits typisch für nicht-diffusive Schemen höherer Ordnung.

3.4 Die Stabilität eines Schemas

In Kapitel 3.1 wurde experimentell festgestellt, dass das Upstream-Schema für die Courant-Zahl $\alpha=0.5$ stabil ist, während für $\alpha=1.5$ eine numerische Instabilität auftrat. In der Praxis ist es von Bedeutung, den Stabilitätsbereich eines Schemas möglichst genau zu kennen. Zur Abklärung dieses Gesichtspunktes eignen sich nur analytische Methoden. Hier werden zwei solche Methoden behandelt, nämlich die Von-Neumann und die Energie-Methode*.

3.4.1 Die Von-Neumann Methode

Die Von-Neumann Methode wird auch als Fouriermethode bezeichnet. Sie basiert auf der Einführung wellenförmiger Störungen der Form

$$\phi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} \tag{3.15}$$

wobei $\omega = k u$ die Kreisfrequenz und k die Wellenzahl bezeichnet. Die dazugehörige Wellenlänge ist $2\pi/k$, die Periode $2\pi/\omega$. Für die meisten physikalischen Systeme lassen sich ω und k nicht unabhängig wählen, sondern nur spezielle Kombinationen $\omega(k)$ sind zugelassen. Die Funktion $\omega = \omega(k)$ wird dabei als *Dispersionsrelation* bezeichnet und diese enthält wertvolle Information über das Verhalten der Wellen. Inbesondere ergibt sich mit

$$v_p = \frac{\omega}{k} \tag{3.16}$$

die Phasengeschwindigkeit der Wellen, und mit

$$c_g = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \tag{3.17}$$

deren *Gruppengeschwindigkeit*. Systeme mit $c_g = v_p$ bezeichnet man als *dispersionsfrei*, solche mit $c_g \neq v_p$ als *dispersiv*.

-

^{*} Dieser Abschnitt folgt teilweise der Diskussion in Riddaway und Hortal (1990).

Die analytische Lösung (2.29) der linearen Advektionsgleichung (3.1) kann für eine wellenförmige Störung der Form (3.15) beschrieben werden durch

$$\phi(x,t) = e^{i k (x - u t)} = e^{i (k x - \omega t)}. \tag{3.18}$$

Die Übersetzung dieser analytischen Lösung auf das numerische Gitter (3.2) ergibt

$$\phi_{i}^{n} = e^{i k (j \Delta x - u \, n \, \Delta t)} = e^{i k \, j \, \Delta x} \, (e^{-i k \, u \, \Delta t})^{n} . \tag{3.19}$$

Jede approximative Lösung eines linearen Schemas kann analog auf die Form

$$\phi_j^n = e^{i k j \Delta x} \quad \lambda^n \tag{3.20}$$

gebracht werden. Der Faktor $\lambda = \lambda(k)$ stellt eine komplexe Zahl dar, mit welcher eine Welle multipliziert werden kann, um den numerischen Übergang vom Zeitniveau n nach n+1 zu beschreiben. Ein perfektes Schema würde $\lambda = e^{-i k u \Delta t}$ ergeben [vergleiche (3.19) und (3.20)]. Somit ergeben sich folgende Stabilitätsbedingungen

$$|\lambda| > 1$$
 instabil (3.21a)

$$|\lambda(k)| \le 1$$
 für $\forall k$ stabil (3.21b)

Im ersten Fall wächst die Amplitude der Welle unphysikalisch bei jedem Zeitschritt an.

Die Von-Neumann Methode basiert darauf, den Faktor λ aus der Schemen-Vorschrift zu berechnen. Dies wird hier anhand des Upstream-Schemas demonstriert. Setzt man (3.20) in (3.6) ein, so ergibt sich

$$\lambda^{n+1} e^{ik j\Delta x} = \lambda^n e^{ik j\Delta x} - \alpha \lambda^n \left(e^{ik j\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x} \right)$$

und nach Division durch $\lambda^n e^{ik j \Delta x}$

$$\lambda = 1 - \alpha + \alpha e^{-ik\Delta x} \ . \tag{3.22}$$

Zur Beurteilung der Stabilität wird der Betrag von λ berechnet. Mit $\left|\lambda\right|^2 = \lambda \overline{\lambda}$ folgt

$$\begin{aligned} \left| \lambda \right|^2 &= \left[(1 - \alpha) + \alpha e^{-ik\Delta x} \right] \left[(1 - \alpha) + \alpha e^{+ik\Delta x} \right] \\ &= (1 - \alpha)^2 + \alpha (1 - \alpha) \left(e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} \right) + \alpha^2 \end{aligned}$$

Die Exponentialterme werden mit trigonometrischen Funktionen ersetzt,

$$|\lambda|^2 = 1 - 2\alpha + 2\alpha^2 + \alpha(1 - \alpha)2\cos(k\Delta x),$$

und schlussendlich ergibt sich

$$\left|\lambda\right|^2 = 1 + 2\alpha(\alpha - 1)\left[1 - \cos(k\Delta x)\right]. \tag{3.23}$$

Das Schema ist stabil falls $|\lambda|^2 \le 1$. Da $\left[1 - \cos(k\Delta x)\right] \ge 0$, ist dies der Fall für

$$\alpha(\alpha - 1) < 0. \tag{3.24}$$

Somit können wir 3 Bereiche unterscheiden

$$\alpha < 0$$
 $|\lambda|^2 > 1$ instabil,
 $0 \le \alpha \le 1$ $|\lambda|^2 \le 1$ stabil,
 $1 \le \alpha$ $|\lambda|^2 > 1$ instabil.

Dies bestätigt das experimentelle Resultat aus Kapitel 3.1, wonach die Stabilität des Upstream Schemas von der Courant-Zahl α abhängig ist. Schemen dieser Art nennt man *bedingt stabil*.

Es gibt auch Schemen, welche *absolut stabil* (stabil für alle α) oder *absolut instabil* (instabil für alle α) sind. Dabei wird auch die Formulierung *bedingungslos* (*in-*)*stabil* verwendet.

Dazu betrachten wir ein weiteres Beispiel, nämlich eine Forward-Differenz in der Zeit, kombiniert mit einer zentrierten Differenz im Raum, also

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0$$
 (3.25)

Das Einsetzen von (3.20) ergibt

$$\frac{1}{\Delta t}(\lambda - 1) + \frac{u}{2\Delta x} \left(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x} \right) = 0$$

womit

$$\lambda = 1 - i\alpha \sin(k\Delta x) \tag{3.26}$$

Es folgt dann

$$\left|\lambda\right|^2 = 1 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta x) \tag{3.27}$$

womit $|\lambda| > 1$ für alle Werte von α und k. Das Schema (3.25) ist also absolut instabil. Dies ist erstaunlich, denn (3.25) kommt durch die Kombination zweier sonst brauchbarer Diskretisierungen zustande.

3.4.2 Phasen und Amplitudenfehler

Als Nebenprodukt der Fouriermethode fällt umfangreiche Information über Phasen- und Amplitudenfehler an. Dazu bringt man λ auf die Form [vergleiche mit (3.18)]

$$\lambda = |\lambda| e^{-i\omega_{num}\Delta t}. \tag{3.30}$$

Zum einen zeigt $|\lambda|$ direkt den *Amplitudenfehler* pro Zeitschritt an, also die unphysikalische Dämpfung (oder das instabile Anwachsen) der Wellen-Amplitude. Zum anderen enthält ω_{num} Information über den *Phasenfehler*, wie im Folgenden ausführlicher diskutiert wird.

Die Darstellung von λ in der Form (3.30) verlangt die Berechnung der Phase $\arg(c)$ einer komplexen Zahl $c = |c|e^{i \arg(c)}$. Zur Berechnung derselben verwendet man dabei in der Praxis am besten die Formel

$$\arg(c) = \arccos\frac{\operatorname{Re}(c)}{|c|} \cdot \operatorname{sign}[\operatorname{Im}(c)], \qquad (3.31)$$

welche mit Hilfe der Vorzeichenfunktion (sign) die Fallunterscheidung erspart.

Zur Analyse des Fehlerverhaltens eines Schemas muss die numerische Dispersionsrelation $\omega_{num} = \omega_{num}(k)$ gewonnen werden. Diese lässt sich gemäss (3.30) berechnen als

$$\omega_{num}(k) = -\frac{\arg(\lambda(k))}{\Delta t}.$$
(3.32)

Für die numerische Phasengeschwindigkeit folgt damit

$$u_{num} = \frac{\omega_{num}}{k} = -\frac{1}{k \Lambda t} \arg(\lambda), \tag{3.33}$$

und für das Verhältnis von theoretischer zu numerischer Phasengeschwindigkeit

$$\frac{u_{num}}{u} = -\frac{1}{uk\Delta t}\arg(\lambda). \tag{3.34}$$

Diese Grösse misst den Phasenfehler als Verhältnis der numerischen zur analytischen Wellengeschwindigkeit.

Eine angemessene dimensionslose Darstellung wird erreicht durch die Verwendung der dimensionslosen Wellenlänge l, welche die Wellenlänge L als

$$L = l \cdot \Delta x = \frac{2\pi}{k} \tag{3.35}$$

in Einheiten von Δx misst. Man beachte dabei, das die kleinste auf einem Rechengitter darstellbare Wellenlänge $2\Delta x$ beträgt. Mit (3.35) ergibt sich für den Phasenfehler

$$\frac{u_{num}}{u} = -\frac{l}{2\pi\alpha} \arg(\lambda) . \tag{3.36}$$

Der λ -Faktor für das Upstream-Schema wurde bereits in (3.22) berechnet. Mit der dimensionslosen Notation (3.35) folgt damit

$$|\lambda| = \left\{1 + 2\alpha(\alpha - 1)\left[1 - \cos(2\pi/l)\right]\right\}^{1/2},\tag{3.37}$$

$$\frac{u_{num}}{u} = -\frac{l}{2\pi\alpha} \arg\left(1 - \alpha + \alpha e^{-i2\pi/l}\right). \tag{3.38}$$

Diese Grössen werden in Fig.3.3 graphisch dargestellt, und dies für verschiedene Werte von α und als Funktion der dimensionslosen Wellenzahl 1/l. Die grafische Darstellung zeigt:

- Das schnellste Wachstum für $\alpha > 1$ erfolgt bei der Wellenlänge l = 2, also bei der kleinsten noch aufgelösten Welle. Dies ist typisch für eine numerische Instabilität.
- Für $\alpha = 0$, $\alpha = 0.5$ und $\alpha = 1$ besteht kein Phasenfehler. Im Bereich $0 < \alpha < 0.5$ wird die Phasengeschwindigkeit unterschätzt, für $0.5 < \alpha < 1$ wird sie überschätzt.

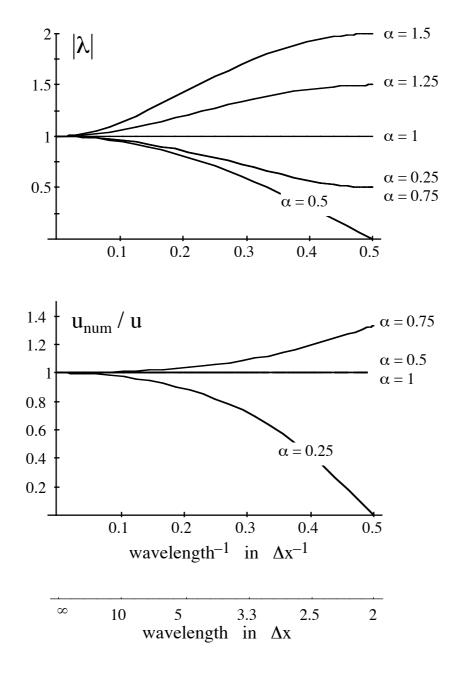


Fig.3.3: (a) Amplitudenfehler und (b) Phasenfehler für das Upstream-Schema als eine Funktion der inversen Wellenlänge und für verschiedene Werte der Courant-Zahl α .

3.4.3 Numerische Dispersion

Die numerische Phasengeschwindigkeit ist im Allgemeinen von der Wellenlänge abhängig (siehe Fig.3.3b für $\alpha=0.25$). Damit wird das dispersionsfreie Advektionsproblem durch numerische Fehler dispersiv. Zur genaueren Analyse dieser Effekte wird das Leapfrog-Schema (siehe Kapitel 3.2) mit der Von-Neumann-Methode untersucht. Setzt man (3.20) ein in die Schemenvorschrift (3.9), so erhält man

$$(\lambda - \lambda^{-1}) + \alpha (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) = 0$$

Mit $(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) = 2 i \sin(k\Delta x)$ ergibt die die quadratische Gleichung

$$\lambda^2 + 2i\lambda\alpha\sin(k\Delta x) - 1 = 0 \tag{3.39}$$

mit den Lösungen

$$\lambda_{1,2} = -i p \pm \sqrt{1 - p^2} \quad \text{wobei} \quad p = \alpha \sin(k\Delta x) . \tag{3.40}$$

Eine dieser zwei Lösungen muss rein numerischen Ursprungs sein, denn die analytische Lösung (3.18) ist eindeutig. Bildet man den Limes $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$, so findet man dass

$$\lambda_1 \rightarrow 1$$

die physikalische Lösung darstellt, während

$$\lambda_2 \rightarrow -1$$

den unerwünschten "numerischen Mode" verkörpert. Dieser hat die unangenehme Eigenschaft, das Vorzeichen der Lösung bei jedem Zeitschritt zu invertieren. Über Methoden, welche diesen Mode unterdrücken, wird später berichtet.

Für $|\alpha| \le 1$ wird die Wurzel in (3.40) reell, und man findet dass

$$|\lambda_{1,2}| \equiv 1$$

Das Leapfrog-Schema ist damit stabil und dämpfungsfrei falls

$$|\alpha| \le 1 \tag{3.41}$$

erfüllt ist. Ein solches Verhalten mit $|\lambda(k)| \equiv 1$ wird auch als *neutral* bezeichnet. Für grössere Courant-Zahlen $|\alpha| > 1$ zeigt eine detailiertere Analyse, dass tatsächlich Instabilität auftritt (siehe Fig.3.4a).

Für die Diskussion von Phasen- und Gruppengeschwindigkeit wird im Folgenden nur der physikalische Mode λ_1 betrachtet. Die numerische Kreisfrequenz ergibt sich mit (3.32) als

$$\omega_{num} = -\frac{1}{\Lambda t} \arg(\lambda_1) = +\frac{1}{\Lambda t} \arccos \sqrt{1 - p^2}$$

Damit folgt nach kurzer Rechnung für die Phasengeschwindigeit

$$\frac{u_{num}}{u} = \frac{1}{u} \frac{\omega_{num}}{k} = \frac{l}{2\pi\alpha} \arccos\sqrt{1 - p^2}$$
(3.42)

und für die Gruppengeschwindigkeit

$$\frac{c_{num}}{u} = \frac{1}{u} \frac{\partial \omega_{num}}{\partial k} = \frac{\cos(2\pi/l)}{\sqrt{1 - p^2}}$$
(3.43)

wobei die Wellenzahl k wiederum durch l ersetzt wurde [siehe (3.35)], so dass

$$p = \alpha \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{l}\right).$$

Die Phasen- und Gruppengeschwindigkeit werden in Fig.3.4 für $\alpha=0.5$ dargestellt. Die Kurven sind für den ganzen Courant-Bereich -1 < α < 1 qualitativ ähnlich. Ein Vergleich mit Fig.3.3b zeigt, dass der Phasenfehler des Leapfrog-Schemas deutlich grösser ist, als derjenige des Upstream-Schemas, selbst wenn beim letzteren eine ungünstige Courant-Zahl gewählt wird.

Der grosse Phasenfehler des Leapfrog-Schemas führt dazu, dass die Gruppengeschwindigkeit im Bereich kurzer Wellen entgegengesetzt zur advektiven Geschwindigkeit ist (siehe Fig.3.4c). Kleinskalige Anomalien können dementsprechend in die falsche Richtung transportiert werden. Dies wird im in Fig.3.5 gezeigten Advektionstest demonstriert. Die Anomalie zur Zeit t=0 setzt sich aus mehreren dreieckigen Anomalien zusammen, deren Grundlinie jeweils $2\Delta x$ misst. Die Hüllkurve hat eine vergleichsweise grosse horizontale Skala und wird qualitativ korrekt nach rechts transportiert (u=1), während die kleinskaligen Anomalien fälschlicherweise nach links transportiert werden.

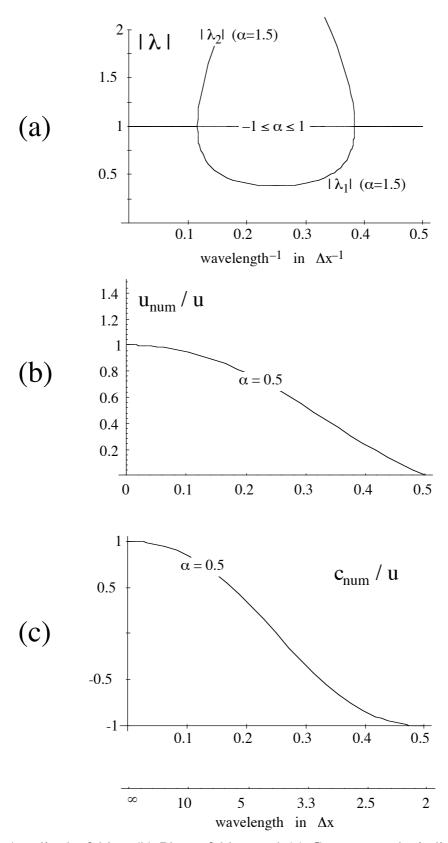


Fig.3.4: (a) Amplitudenfehler, (b) Phasenfehler, und (c) Gruppengeschwindigkeit für das Leapfrog-Schema als eine Funktion der inversen Wellenlänge. Die Kurven in (a) beziehen sich auf die Courant-Zahlen $-1 \le \alpha \le 1$ und $\alpha = 1.5$. Dabei bezeichnen λ_1 und λ_2 den physikalischen und rechnerischen Mode. Die Courant-Zahl in (b) und (c) ist $\alpha = 0.5$.

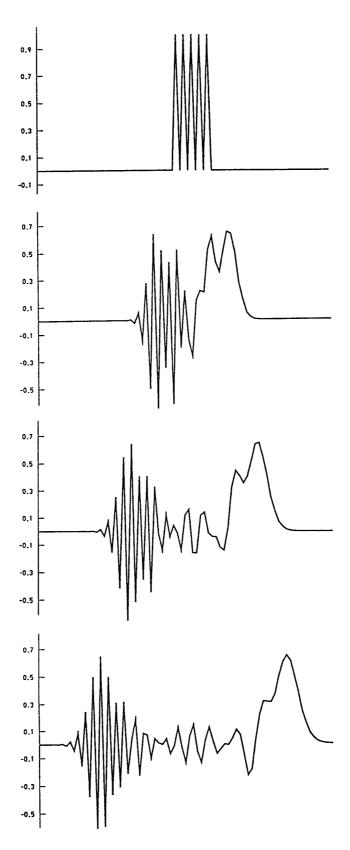


Fig.3.5: Advektionstest (mit Verschiebung von links nach rechts) für eine Zickzack-Anomalie mit dem Leapfrog-Schema und einer Courant-Zahl von α =0.5. Die Basis der einzelnen Dreiecke der Zickzack-Kurve misst anfänglich 2 Δx . Die 4 Diagramme sind für n=0, 16, 32 und 48 Zeitschritte.

3.4.4 Die Energiemethode

Die in Kapitel 3.4.1 eingeführte Von-Neumann-Methode lässt sich nur auf lineare Schemen anwenden. Ist die Schemenvorschrift $\phi^n \to \phi^{n+1}$ nichtlinear, so kann das Schema nicht auf eine komplexe Zahl $\lambda(k)$ reduziert werden, da ein einzelner Zeitschritt neben Phase und Amplitude auch die Wellenform verändern kann. In solchen Fällen wird oft auf die Energiemethode zurückgegriffen. Diese beruht auf dem analytischen Beweis, dass eine Art von Energie (eventuell nicht-physikalischer Art) durch das Schema erhalten beziehungsweise reduziert wird.

Für die Advektionsgleichung (3.1) in einem periodischen Gebiet $0 \le x \le L$ ist die "Energie"

$$E = \int_0^L \phi^2 dx$$

erhalten. Dies kann leicht nachgeprüft werden, denn

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \int_0^L 2\phi \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = -u \int_0^L 2\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = -u \int_0^L \frac{\partial \phi^2}{\partial x} dx = -u \phi^2 \Big|_0^L = 0.$$

Kann für ein numerisches Schema gezeigt werden, dass die analoge "numerische Energie"

$$E^n = \sum_{i} \left(\phi_j^n \right)^2$$

mit der Zeit konstant bleibt oder abnimmt, so ist dieses Schema stabil.

Als Beispiel dient das Upstream-Schema (3.6) in der Form

$$\phi_{i}^{n+1} = (1-\alpha)\phi_{i}^{n} + \alpha\phi_{i-1}^{n}$$
.

Nach dem Quadrieren beider Seiten, und nach der Summation über j, ergibt sich

$$\sum_{j} (\phi_{j}^{n+1})^{2} = \sum_{j} \left[(1-\alpha)^{2} (\phi_{j}^{n})^{2} + 2\alpha (1-\alpha) \phi_{j}^{n} \phi_{j-1}^{n} + \alpha^{2} (\phi_{j-1}^{n})^{2} \right].$$

Mit der Schwarz'schen Ungleichung folgt

$$\sum_{j} \phi_{j}^{n} \phi_{j-1}^{n} \leq \sqrt{\sum_{j} \left(\phi_{j}^{n}\right)^{2}} \sqrt{\sum_{j} \left(\phi_{j-1}^{n}\right)^{2}} = \sum_{j} \left(\phi_{j}^{n}\right)^{2}.$$

Ist nun α $(1-\alpha) \ge 0$, so ergibt sich

$$\sum_{j} \left(\phi_{j}^{n+1} \right)^{2} \leq \left[(1-\alpha)^{2} + 2\alpha(1-\alpha) + \alpha^{2} \right] \sum_{j} \left(\phi_{j}^{n} \right)^{2} = \sum_{j} \left(\phi_{j}^{n} \right)^{2}.$$

Damit ist $E^{n+1} \le E^n$, und das Schema ist stabil. Die verwendete Annahme $\alpha(1-\alpha) \ge 0$ ergibt den Stabilitätsbereich $0 \le \lambda \le 1$, welcher sich mit den Resultaten aus Kapitel 3.4.1 deckt.

3.4.5 Das Courant-Friedrichs-Levy Kriterium

Es fällt auf, dass sowohl für das Leapfrog-Schema als auch für das Upstream-Schema $|\alpha| \le 1$ eine notwendige Bedingung für Stabilität ist. Diese Koinzidenz ist kein Zufall, sondern ihr liegt das übergeordnete *Courant-Friedrichs-Levy*-Kriterium (kurz CFL-Kriterium) zugrunde.

Das CFL-Kriterium verlangt, dass der physikalische Abhängigkeitsbereich von ϕ_j^{n+1} im numerischen Abhängigkeitsbereich enthalten sein muss. Diese Situation wird in Fig.3.6 skizziert. Die Symbole zeigen diejenigen Gitterpunkte, von welchen ϕ_j^{n+1} abhängt. Die physikalische Informationsausbreitung erfolgt entlang von Charakteristiken mit der Form

$$x - ut = \text{const}$$
,

wie das der analytischen Lösung (2.29) entnommen werden kann. Die Steigung der damit beschriebenen Geraden ist gegeben durch u^{-1} , und sie verläuft innerhalb des numerischen Abhängigkeitsbereichs des Leapfrog-Schemas falls

$$|u| \le \frac{\Delta x}{\Delta t}.\tag{3.44}$$

Damit wird das Stabilitätskriterium (3.41) reproduziert. Eine analoge Betrachtung ist auch für das Upstream-Schema erfolgreich.

Das CFL-Kriterium in der Form

$$\left| c \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| \le 1 \tag{3.45}$$

ist eine notwendige (aber keine hinreichende) Stabilitäts-Bedingung für eine grosse Kategorie von numerischen Schemen. Im Falle eines komplexen Gleichungssystems ist dabei für c die schnellste Geschwindigkeit einzusetzen, mit welcher sich im betreffenden System Information fortpflanzen kann. Dies ist

$$c = \max \left| \mathbf{u} + \mathbf{c}_g \right| \,, \tag{3.46}$$

wobei \mathbf{u} die advektive Geschwindigkeit, und \mathbf{c}_g die Gruppengeschwindigkeit bezeichnet. Der kritische Faktor, welcher den Zeitschritt begrenzt, ist dabei häufig die Gruppengeschwindigkeit. In der Atmosphäre spielen hier zum Beispiel die Schallwellen eine wichtige Rolle, welche infolge ihrer grossen Ausbreitungsgeschwindigkeit einen kleinen Zeitschritt erzwingen können.

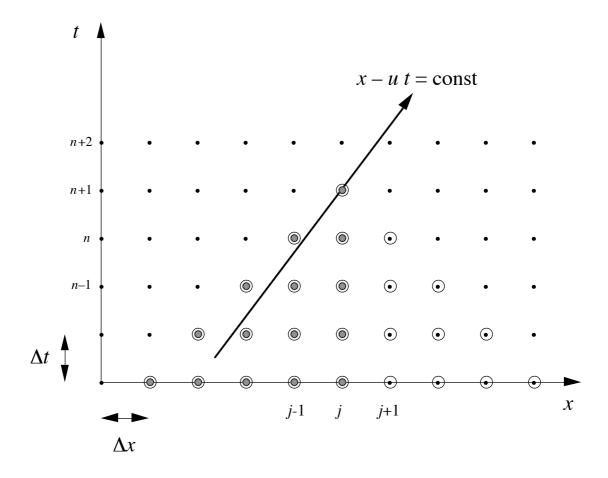


Fig.3.6: Numerischer Abhängigkeitsbereich von ϕ_j^{n+1} für das Upstream-Schema (\bullet -Symbole) und das Leapfrog-Schema (\bigcirc -Symbole). Der physikalische Abhängigkeitsbereich im Falle linearer Advektion wird durch die Charakteristik x-ut=const beschrieben. (Nach Haltiner und Williams, 1980)

3.5 Konvergenz und Konsistenz von Schemen

Aus Kapitel 3.3 folgt, dass der Diskretisierungsfehler <u>pro Zeitschritt</u> je nach der Ordnung m des Schemas mit $O(\Delta x^m)$ abnimmt. Da ein kleinerer Gitterabstand jedoch meist auch einen kleineren Zeitschritt (und damit eine grössere Anzahl von Zeitschritten) notwendig macht, ist nicht a priori klar, ob durch Verkleinerung des Gitterabstandes letztendlich die korrekte Lösung resultiert. Die hier aufgeworfene Frage ist jene der Konvergenz.

Ein numerisches Schema wird genau dann als *konvergent* bezeichnet, falls für $\Delta x \rightarrow 0$ und $\Delta t \rightarrow 0$ die exakte Lösung resultiert. Die Beurteilung dieser Eigenschaft erfolgt anhand des Lax-Richtmeyer Theorems (Lax und Richtmyer 1956):

Ein lineares numerisches Schema der finiten Differenzen ist genau dann *konvergent*, wenn es konsistent und stabil ist.

Unter Konsistenz versteht man dabei, dass der Diskretisierungsfehler pro Zeitschritt für $\Delta x \rightarrow 0$ und $\Delta t \rightarrow 0$ verschwindet. Dieser Begriff ist eng verbunden mit der Ordnung eines Schemas (siehe Kapitel 3.3). Als Beispiel betrachten wir wiederum das Upstream-Schema. Dieses Schema ist linear und der Diskretisierungsfehler F der räumlichen Upstream-Differenz und der zeitlichen Forward-Differenz lassen sich ausdrücken als

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i}^{n} = \frac{\phi_{i}^{n} - \phi_{i-1}^{n}}{\Delta x} + F_{upstream} , \qquad \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_{i}^{n} = \frac{\phi_{i}^{n+1} - \phi_{i}^{n}}{\Delta t} + F_{forward} ,$$

wobei gemäss (3.11b)

$$F_{upstream} = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i^n \frac{\Delta x}{2} + O(\Delta x^2), \qquad F_{forward} = -\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right)_i^n \frac{\Delta t}{2} + O(\Delta t^2). \tag{3.50}$$

Für das ganze Upstream-Schema wird der Diskretisierungsfehler ersichtlich aus

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_{i}^{n} + u \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i}^{n} = \frac{\phi_{i}^{n+1} - \phi_{i}^{n}}{\Delta t} + F_{forward} + u \frac{\phi_{i}^{n} - \phi_{i-1}^{n}}{\Delta x} + u F_{upstream} . \tag{3.51}$$

Für $\Delta x \to 0$ und $\Delta t \to 0$ verschwinden die *F*-Terme, womit das ganze Schema konsistent ist. Mit der bereits in Kapitel 3.4 analysierten Stabilität des Schema folgt dann gemäss Lax-Richtmyer-Theorem die Konvergenz des Upstream-Schemas.

Die meisten Verfahren in dieser Vorlesung sind linear und es ist einfach den Konsistenz-Beweis zu führen. Hingegen ist es oft schwierig (insbesondere für nichtlineare Gleichungssysteme), die Stabilität nachzuprüfen. Bei nichtlinearen Verfahren muss der Begriff der Stabilität völlig neu definiert werden und die Konvergenz ist nur schwierig zu zeigen.

3.6 Schemen höherer Ordnung

Eine der Schwächen zahlreicher Schemen ist der grosse Phasenfehler, welcher zum Beispiel beim Leapfrog-Schema (Kap. 3.4.3) verheerend wirken kann. Diese Phasenfehler können durch die Verwendung von präziseren Approximationen im Raum reduziert werden.

3.6.1 Zentrierte räumliche Differenzen höherer Ordnung

Als erstes Beispiel werden zentrierte räumliche Differenzen höherer Ordnung betrachtet. Diese können verwendet werden in Kombination mit zahlreichen Zeitschrittverfahren (Leapfrog, Implizit, zahlreiche Mehrschrittverfahren), nicht jedoch mit dem Forward-Schritt. Ausgangspunkt ist eine verallgemeinerte räumliche Ableitung der Form

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \beta \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} + \gamma \frac{\phi_{j+2} - \phi_{j-2}}{4\Delta x} , \qquad (3.60)$$

wobei $\beta + \gamma = 1$. Faktisch ist dies ein gewichtetes Mittel der Differenzen über $2\Delta x$ und $4\Delta x$. Die Wahl von β und γ erfolgt nun so, dass die Ordnung des Schemas optimiert wird.

(A) OPTIMIERUNG DER RÄUMLICHEN ORDNUNG

Für die zentrierte Differenz 2. Ordnung ($\beta = 1$, $\gamma = 0$) wurde bereits in (3.13) festgestellt, dass sich der Diskretisierungsfehler darstellen lässt als

$$\phi'_{j} = \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} - \phi''_{j} \frac{\Delta x^{2}}{3!} - \phi''_{j} \frac{\Delta x^{4}}{5!} + O(\Delta x^{6}) , \qquad (3.71)$$

wobei $\phi', \phi'', ..., \phi^{(v)}$ räumliche Ableitungen bezeichnen. Ersetzt man in (3.71) den Gitterabstand Δx durch $2\Delta x$, so folgt

$$\phi'_{j} = \frac{\phi_{j+2} - \phi_{j-2}}{4\Delta x} - \phi'''_{j} \frac{\Delta x^{2}}{3!} - \phi''_{j} 16 \frac{\Delta x^{4}}{5!} + O(\Delta x^{6}) . \tag{3.72}$$

Die mit β und γ gewichtete Summe von (3.71) und (3.72) ergibt dann den Diskretisierungsfehler der Ableitung (3.70) gemäss

$$\phi'_{j} = \beta \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} + \gamma \frac{\phi_{j+2} - \phi_{j-2}}{4\Delta x} + F$$
(3.73a)

mit

$$F = -(\beta + 4\gamma) \phi''' \frac{\Delta x^2}{3!} - (\beta + 16\gamma) \phi_j^{(v)} \frac{\Delta x^4}{5!} + O(\Delta x^6) . \tag{3.73b}$$

Der Fehlerterm 2. Ordnung kann zum Verschwinden gebracht werden, falls

$$\beta + 4 \gamma = 0.$$

Zusammen mit der Konsistenzbedingung $\beta + \gamma = 1$ folgt damit

$$\beta = 4/3$$
 und $\gamma = -1/3$. (3.74)

Mit dieser Wahl von β und γ ist der dominierende Term des Diskretisierungsfehlers (3.73) proportional zu Δx , d.h. die räumliche Diskretisierung ist 4. Ordnung. Es ist offensichtlich, dass das hier verwendete Verfahren verallgemeinert werden kann. Werden zum Beispiel in (3.70) auch Terme der Form

$$\frac{\phi_{j+3} - \phi_{j-3}}{6 \, \Delta x}$$

berücksichtigt, so kann auch der Fehlerterm 4. Ordnung zum Verschwinden gebracht werden, worauf eine räumliche Diskretisierung 6. Ordnung entsteht.

(B) STABILITÄT UND PHASENFEHLER

Zur weiteren Analyse betrachten wir wiederum das lineare Advektionsproblem. Mit dem Leapfrog-Zeitschritt ergibt sich aus (3.70) und (3.74)

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^{n-1} - \alpha \left[\frac{4}{3} (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) - \frac{1}{6} (\phi_{j+2} - \phi_{j-2}) \right], \tag{3.75}$$

wobei $\alpha = u \Delta t / \Delta x$ die Courant-Zahl beschreibt. Dieses Schema kann verglichen werden mit dem klassischen Leapfrog-Schema (3.9).

Die Anwendung der Fourier-Methode auf (3.75) ergibt, ähnlich wie in (3.39), eine quadratische Gleichung für λ der Form

$$\lambda^2 + 2i\lambda \stackrel{\sim}{p} - 1 = 0 , \qquad (3.76a)$$

aber diesmal mit

$$\stackrel{\sim}{p} = \alpha \sin(k \, \Delta x) \left[\frac{4}{3} - \frac{1}{3} \cos(k \, \Delta x) \right]. \tag{3.76b}$$

Man kann zeigen, dass das Schema (3.75) neutral ($|\lambda| = 1$) und stabil ist für

$$|\alpha| \le \frac{1}{25} (4 + 6\sqrt{6}) \sqrt{\sqrt{6} - 3/2} \approx 0.729$$
 (3.77)

Der Stabilitätsbereich ist also kleiner (!) als beim Leapfrog-Schema 2. Ordnung.

Die Verbesserung des Phasenfehlers (siehe Fig.3.7a) ist jedoch signifikant. Selbst Wellen mit Wellenlängen um $5\Delta x$ werden noch in guter Qualität advergiert. Die kurzen $2\Delta x$ -Wellen andererseits bleiben am Ort stehen , wie es bereits beim klassischen Leapfrog-Schema der Fall war. Damit folgt, dass die unerwünschten dispersiven Eigenschaften auch bei räumlicher Approximation 4. Ordnung auftreten. Die kleinskaligsten Strukturen werden sogar mit c_{num} <-u transportiert. Diese Eigenschaft kann nur "korrigiert" werden, indem die kleinskaligen Strukturen fortlaufend durch räumliches Filtern gedämpft werden (siehe dazu Kapitel 5).

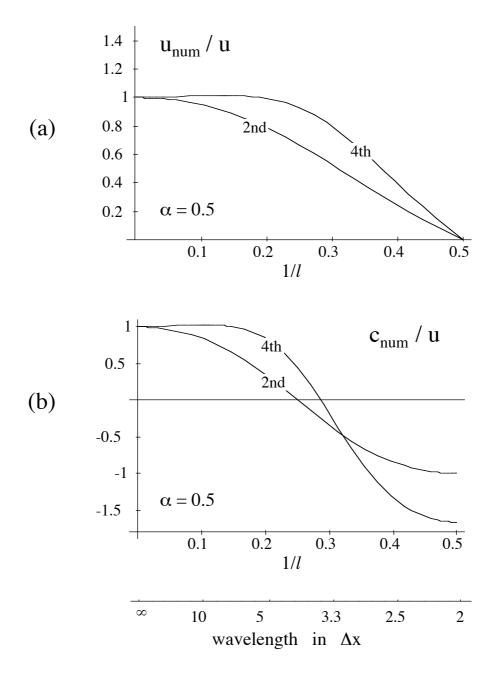


Fig.3.7: Numerische Phasen- und Gruppengeschwindigkeit für lineare Advektion mit dem Leapfrog-Zeitschritt. Die beiden Kurven gelten jeweils bei räumlicher Approximation 2. und 4. Ordnung, sowie für die Courant-Zahl α =0.5.

3.6.2 Höhere räumliche Ordnung beim Upstream-Schema

Das in Kapitel 3.1 betrachtete Upstream-Schema entsteht aus der Kombination einer Forward-Differenz in der Zeit sowie einer Upstream-Differenz im Raum. Eine alternative Interpretation dieses Schemas beruht auf der Analyse der Charakteristiken

$$x - u t = const.$$

entlang welcher Information advergiert wird. Im Falle linearer Advektion lässt sich die analytische Lösung (2.29) in folgender Art nutzen:

$$\phi_j^{n+1} = \phi^n \left[x = j \Delta x - u \Delta t \right] = \phi^n \left[x = \Delta x \left(j - \frac{u \Delta t}{\Delta x} \right) \right] = \phi_{j-\alpha}^n$$
 (3.80)

Der Wert von ϕ^n an der Stelle j- α kann dann durch Interpolation auf dem Gitter gewonnen werden. Mit linearer Interpolation ergibt sich

$$\phi_{j-\alpha}^{n} = (1-\alpha)\phi_{j}^{n} + \alpha\phi_{j-1}^{n} = \phi_{j}^{n} - \alpha(\phi_{j}^{n} - \phi_{j-1}^{n})$$
(3.81)

und mit dem Einsetzen in (3.80) folgt das Upstream-Schema (3.6).

Das eben betrachtete Verfahren kann zur Konstruktion zahlreicher Schemen verwendet werden. Dabei wird die lineare Interpolation durch andere Methoden ersetzt.

(A) DAS LAX-WENDROFF-SCHEMA

Dieses Schema ergibt sich bei der Verwendung quadratischer Interpolation im Intervall $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. In diesem Intervall wird ϕ^n approximiert durch

$$\phi_{i+\mu}^n = a\mu^2 + b\mu + c .$$

Die Parameter a,b und c werden dabei aus den Gitterpunktswerten $\phi_{j-1},\phi_j,\phi_{j+1}$ bestimmt. Mit

$$\phi_{j-1}^n \ = \ a-b+c \,, \quad \phi_j^n \ = \ c \,, \quad \phi_{j+1}^n \ = \ a+b+c$$

erhält man

$$c = \phi_j^n$$
, $b = \frac{1}{2} (\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n)$, $a = \frac{1}{2} (\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n)$,

womit gemäss (3.80)

$$\phi_j^{n+1} = \phi_{j-\alpha}^n = \phi_j^n - \frac{\alpha}{2} \left(\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n \right) + \frac{\alpha^2}{2} \left(\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n \right)$$
(3.82)

Dies ist das Lax-Wendroff-Schema. Es ist stabil für $|\alpha| \le 1$ und hat den Vorteil (trotz 2. Ordnung in Raum und Zeit) nur zwei Zeitniveaus zu benötigen.

Das Lax-Wendroff-Schema lässt sich auch als Zwei-Stufen-Verfahren schreiben. Im ersten Forward-Schritt werden provisorische Werte ("predictor") zur Zeit n + 1/2 ermittelt, d.h.

$$\phi_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left(\phi_{j+1}^n + \phi_j^n \right) - \frac{\alpha}{2} \left(\phi_{j+1}^n - \phi_j^n \right). \tag{3.83a}$$

Anschliessend folgt ein Leapfrog-Schritt der Art

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \alpha \left(\phi_{j+1/2}^{n+1/2} - \phi_{j-1/2}^{n-1/2} \right). \tag{3.83b}$$

Die beim ersten Schritt anfallenden Werte $\phi_{j+1/2}^{n+1/2}$ liegen dabei zwischen den ursprünglichen Gitterpunkten. In diesem Zusammenhang spricht man im englischen Sprachbereich von "staggered variables".

(B) INTERPOLATION 3. ORDNUNG

Verwendet man zur Interpolation ein Polynom 3. Grades, so ergibt sich analog

$$\begin{split} \phi_{j}^{n+1} &= \phi_{j}^{n} - \frac{\alpha}{6} \left[2 \, \phi_{j+1}^{n} + 3 \phi_{j}^{n} - 6 \phi_{j-1}^{n} + \phi_{j-2}^{n} \right] \\ &+ \frac{\alpha^{2}}{2} \left[\phi_{j+1}^{n} - 2 \, \phi_{j}^{n} + \phi_{j-1}^{n} \right] \\ &- \frac{\alpha^{3}}{6} \left[\phi_{j+1}^{n} - 3 \, \phi_{j}^{n} + 3 \phi_{j-1}^{n} - \phi_{j-2}^{n} \right] \end{split}$$

Dieses Schema ist, ähnlich wie das Upstream-Schema stabil für $0 \le \alpha \le 1$.