5. Nichtlinearität

Bis anhin wurde ausschliesslich die numerische Integration von linearen Gleichungen der Form

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi) \quad \text{mit} \quad \phi = \phi(x,t)$$
 (5.1)

untersucht. Eine Gleichung dieser Art bezeichnet man genau dann als linear, wenn mit den Lösungen $\phi_I(x, t)$ und $\phi_2(x, t)$ auch

$$a\phi_1(x,t) + b\phi_2(x,t)$$
 (5.2)

eine Lösung darstellt. In Kapitel 2.4 wurde nachgeprüft, dass diese Bedingung durch die lineare Advektion (2.27) erfüllt wird. Die Linearität hat attraktive Konsequenzen. Wird zum Beispiel eine Anfangsbedingung $\phi(x, t=0)$ als eine Fourierreihe der Form

$$\phi(x,t=0) = a_1 e^{i k_1 x} + a_2 e^{i k_2 x} + \dots$$
(5.3)

dargestellt, so folgt mit der Linearität automatisch, dass jede Wellenkomponente einzeln und unabhängig von den anderen integriert werden kann, und dass die verschiedenen Komponenten zu einem späteren Zeitpunkt t >0 zur Lösung $\phi(x, t>0)$ rekombiniert werden können. Betrachtet man im weiteren ein lineares Schema, so folgt dass die Schemenvorschrift allein durch eine komplexe Zahl $\lambda(k)$ beschreibbar ist, welche nur von der Wellenlänge kabhängt. Dies stellt die Grundlage dar zur im Kapitel 3.4 oft verwendeten Von-Neumann-Methode.

Viele Probleme in der Umwelt haben jedoch einen nichtlinearen Charakter. Als Beispiel diene die Bildung eines Tiefdruckgebiets in der Atmosphäre. Anfänglich kann ein Tiefdruckgebiet aus einer schwachen, grossskaligen Anomalien (mit horizontalen Skalen von einigen tausend Kilometern) entstehen. Beim nichtlinearen Wachstum dieser Anomalien entstehen jedoch neue mesoskalige Strömungsphänomene, z.B. eine Kaltfront, von weit kleinerer horizontaler Skala. Diese Strukturen können so scharf werden, dass man von einem eigentlichen Skalenkollaps spricht. Das Verhalten numerischer Verfahren im Kontext von Nichtlinearität verdient deshalb spezielle Aufmerksamkeit.

5.1 Nichtlineare Instabilität und Aliasing

(I) DAS PROBLEM

Als erstes Beispiel wird die nichtlineare Advektionsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{oder} \quad \frac{Du}{Dt} = 0$$
 (5.4)

betrachtet. Diese Gleichung wird auch als Burgers-Gleichung bezeichnet. Der Anfangszustand sei

$$u(x,t=0) = -\sin(2\pi x)$$
(5.5)

im periodischen Gebiet $-0.5 \le x \le 0.5$. Die analytische Lösung dazu wird in Fig.5.1 dargestellt. Die Lösung sieht ähnlich aus wie eine sich überschlagende Welle. Zwischen t = 0.125 und t = 0.25 bildet sich eine Diskontinuität.

Die numerische Lösung, erhalten mit dem Leapfrog-Schema und $\Delta x = 1/40$, $\Delta t = 1/80$, wird in Fig.5.2 gezeigt. Die numerische Simulation ist offenbar instabil, obwohl das lineare Stabilitätskriterium erfüllt ist. Man spricht deshalb von *nichtlinearer Instabilität*.

(II) DIE URSACHE

Die Ursache für die nichtlineare Instabilität liegt in der mangelhaften numerischen Beschreibung der *Skalenwechselwirkung*. Diese wird verursacht durch nichtlineare Terme der Form $u\partial u / \partial x$ wie sie in (5.4) auftreten. Schreibt man die beiden Faktoren in der Fourierdarstellung als

$$u = \sum_{l} a_{l} e^{ik_{l}x} \quad \text{und} \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{l} i a_{l} k_{l} e^{ik_{l}x}, \quad (5.7)$$

so enthält $u \partial u / \partial x$ nichtlineare Terme der Form

$$N = \left(e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}\right) \left(e^{ik_2x} + e^{-ik_2x}\right).$$
(5.8)

Dabei wurden die Terme so zusammengefasst, dass die beiden Faktoren jeweils einer reellen Welle (mit Wellenzahlen k_1 und k_2) entsprechen. Beim Ausmultiplizieren ergibt sich

$$N = \left(e^{i(k_1 + k_2)x} + e^{-i(k_1 + k_2)x}\right) + \left(e^{i(k_1 - k_2)x} + e^{-i(k_1 - k_2)x}\right),$$
(5.9)

was als Summe zweier Wellen mit den Wellenzahlen

 $k_1 + k_2$ und $k_1 - k_2$ (5.10)

interpretiert werden kann. Das Auftauchen solcher Wellen mit vorher nicht vertretenen Wellenlängen ist ein typischer Effekt der nichtlinearen Skalenwechselwirkung.

Die Probleme bei der numerischen Beschreibung dieser Prozesse sind bedingt durch die beschränkte spektrale Auflösung. Auf einem Gitter beträgt die kleinste auflösbare Wellenlänge $\lambda_{\min} = 2\Delta x$ und die grösste Wellenzahl ist somit

$$k_{\max} = \frac{\pi}{\Delta x} . \tag{5.11}$$

Vom *Aliasing-Fehler* spricht man dann, wenn die nichtlineare Wechselwirkung eine Welle zu erzeugen versucht, welche durch das vorliegende Gitter nicht aufgelöst werden kann. Für die Analyse dieses Fehlers nehmen wir an, dass eine zu kurze Welle (d.h. $k > k_{max}$) der Form

$$\phi_k = e^{ikx} + e^{-ikx} \tag{5.12}$$

erzeugt wird. Setzt man

$$k_a := 2k_{\max} - k , \qquad (5.13)$$

so folgt für (5.12)



Fig.5.1: Analytische Lösung der Burger-Gleichung (5.4) mit einer Sinsförmigen Anfangsbedingung.

$$\phi_k = e^{2ik_{\max}x} e^{-ik_ax} + e^{-2ik_{\max}x} e^{ik_ax}$$

Betrachtet man jetzt die Welle auf dem numerischen Gitter, so verschwinden die Faktoren mit k_{max} gemäss

$$e^{2ik_{\max}x}\Big|_{x=j\Delta x} = e^{2i\pi j} = 1$$
,

und ϕ_k wird fälschlicherweise dargestellt als

$$\phi_k = e^{i \, k_a \, x} + e^{-i \, k_a \, x} \tag{5.14}$$

mit der Wellenzahl k_a . Diese Welle kann, anders als die ursprüngliche Welle mit Wellenzahl k selbst, auf dem Gitter dargestellt werden. Eine Illustration des Aliasing-Fehlers wird in Fig.5.4 gezeigt.

(III) DIE "KUR"

Eine Methode zur Unterdrückung der nichtlinearen Instabilität folgt direkt aus obiger Diskussion. Eliminiert man nach jedem Zeitschritt alle Wellen mit Wellenlängen $\lambda < 4\Delta x$, d.h. mit Wellenzahlen

$$k > k_{\max}/2$$
, (5.15)

so hat die kürzeste Welle, welche durch quadratische Skalenwechselwirkung erzeugt werden kann, gemäss (5.10) eine Wellenzahl von

$$k = 2(k_{\max}/2) = k_{\max}$$

Dies entspricht einer $2\Delta x$ -Welle, welche auf dem Gitter gerade noch dargestellt werden kann.

Die exakte Durchführung des oben beschriebenen Vorganges würde bei jedem Zeitschritt eine Fouriertransformation sowie Filterung im spektralen Raum und anschliessende Rücktransformation verlangen. Dies ist ein aufwendiges Prozedere. Man verfährt deshalb heuristisch und verwendet anstelle dessen digitale Filter. Eine numerische Integration dazu wird in Fig.5.3 gezeigt. Hier wird die Simulation von Fig.5.2 wiederholt, aber nach jedem Zeitschritt wird die Filteroperation

$$\widetilde{\phi}_{i} = \phi_{i} + \frac{1}{4} (\phi_{i-1} - 2\phi_{i} + \phi_{i+1})$$
(5.16)

dreimal angewendet. Der Vergleich mit Fig.5.2 illustriert, wie dadurch die Instabilität unterdrückt werden kann.



Fig.5.2: Numerische Lösung der Burger-Gleichung mit dem Leapfrog-Schema und einer Auflösung von 40 Gitterpunkten pro Periode. Der Zeitschritt wurde so gewählt dass die maximale Courant-Zahl anfänglich α =0.5 beträgt.



0.0

Fig.5.3: Wie Fig.5.2, aber zusätzlich wird nach jedem Zeitschritt dreimal das Filter (5.16) angewendet



Fig.5.4: Illustration des Aliasing-Fehlers: (a) Eine Welle mit Wellenlänge $4\Delta x / 3$ (durchgezogene Linie) wird auf einem Gitter fälschlicherweise als eine Welle mit Wellenlänge $4\Delta x$ dargestellt. (b) Schematische Darstellung im spektralen Raum: Die Wellenlängen im grau unterlegten Bereich des Spektrums können korrekt dargestellt werden. Eine Wellenlänge k ausserhalb dieses Bereichs wird fälschlicherweise als $2k_{max}-k$ interpretiert.

5.2 Ideale Filter

Die in Fig.5.3 gezeigte Integration demonstriert einerseits, wie die nichtlineare Instabilität unterdrückt werden kann. Andererseits ist im Diagramm zur Zeit t = 0.1 aber auch zu erkennen, dass die exakte Lösung (dünne Linie) nur schlecht approximiert wird. Dieser Fehler ist eine direkte Folge des Filterungsprozesses und ist auf die schwache Skalenselektion desselben zurückzuführen: Das Filter entfernt nicht nur die kurzen Wellen, offensichtlich sind auch längere Wellen davon betroffen, welche zum Aliasing-Fehler nichts beitragen würden.

Das Ziel dieses Abschnitts besteht darin, optimale Filter zu entwickeln, welche skalenselektiv arbeiten. Die Eigenschaften des Filters werden wiederum durch einen komplexen Faktor $\lambda(k)$ beschrieben, welcher die Wirkung des Filters auf eine Welle mit Wellenzahl k beschreibt. Von einem optimalen Filter spricht man, wenn im Bereich $0 \le k \le k_{\text{max}}$ folgende Bedingungen erfüllt sind:

$$\lambda(k) \in R \tag{5.20a}$$

$$0 \le \lambda \le 1 \tag{5.20b}$$

$$\lambda (k = k_{\max}) = 0 \tag{5.20c}$$

$$\lambda(k=0) = 1 \tag{5.20d}$$

Die erste Bedingung stellt sicher, dass das Filter keine Phasenverschiebung verursacht. Die zweite Bedingung garantiert, dass das Filter keine Welle verstärken kann. Die letzten zwei Bedingungen drücken aus, dass die kürzesten Wellen ($k = k_{max}$) vollkommen eliminiert werden soll, während unendlich lange Wellen (k = 0) erhalten bleiben sollen. Im Folgenden betrachten wir zwei Filter dieser Art.

(I) IDEALES FILTER 1. ORDNUNG

Von einem Filter der 1. Ordnung spricht man, falls es die Form

$$\tilde{\phi}_{j}^{(1)} = a_{1}\phi_{j-1} + a_{0}\phi_{j} + a_{1}\phi_{j+1}$$
(5.21)

hat. Die hier verwendete Form stellt im weiteren sicher, dass das Filter symmetrisch ist (Koeffizienten von ϕ_{j-1} und ϕ_{j+1} sind identisch). Die Eigenschaften des Filters auf eine Welle der Form $\phi = e^{ikx}$ ergeben sich unter Verwendung von

$$\phi_j = \phi(x = j\Delta x) = e^{ijk\Delta x}$$
(5.22)

als

$$\widetilde{\phi}_{j}^{(1)} = \left(a_{1}e^{-ik\,\Delta x} + a_{0} + a_{1}e^{ik\,\Delta x}\right)\phi_{j}$$

Der Ausdruck in der Klammer stellt den λ -Faktor dar. Dieser lässt sich vereinfachen zu

$$\lambda(k) = a_0 + 2a_1 \cos(k \Delta x) . \tag{5.23}$$

Die Koeffizienten von a_1 und a_0 werden jetzt so gewählt, dass (5.20) erfüllt ist. Mit $k_{\text{max}} = \pi/\Delta x$ ergibt sich für (5.20c)

$$a_0 - 2a_1 = 0$$
,

und für (5.20d) folgt

 a_1

 $a_0 + 2a_1 = 1$.

Die Auflösung dieser beiden Gleichungen ergibt

$$a_0 = 1/4$$
, $a_0 = 1/2$. (5.24)

Man kann im weiteren nachprüfen, dass auch (5.20a) und (5.20b) erfüllt sind.

Das so gewonnene Filter kann auf die Form

$$\tilde{\phi}_{j}^{(1)} = \phi_{j} + \frac{\mu}{4} (\phi_{j-1} - 2\phi_{j} + \phi_{j+1})$$
(5.25)

mit $\mu = 1$ gebracht werden. Das Filter ist aber auch stabil (d.h. $|\lambda| \le 1$) für

$$0 \le \mu \le 1 . \tag{5.26}$$

Ein Vergleich mit (5.16) zeigt, dass dieses Filter bereits im numerischen Experiment von Fig.5.3 verwendet wurde. Eine grafische Darstellung des λ -Faktors wird in Fig.5.5 gezeigt (Kurve welche mit "1" markiert ist). Daraus geht hervor, dass das Filter nach 1000-facher Anwendung selbst Wellen der Wellenlänge $10\Delta x$ vollständig eliminiert.

(II) IDEALES FILTER 2. ORDNUNG

Der starken Dämpfung der langen Wellen soll mit dem Filter zweiter Ordnung

$$\widetilde{\phi}_{j}^{(2)} = a_{2}\phi_{j-2} + a_{1}\phi_{j-1} + a_{0}\phi_{j} + a_{1}\phi_{j+1} + a_{2}\phi_{j+2}$$
(5.27)

entgegengewirkt werden. Analog oben kann man die Filterfunktion $\lambda(k)$ bestimmen. Es ergibt sich

$$\lambda(k) = a_0 + 2a_1 \cos(k \,\Delta x) + 2a_2 \cos(2k \,\Delta x) .$$
(5.28)

Die Bedingungen (5.20c) und (5.20d) ergeben die Gleichungen

$$\lambda(k = \pi/\Delta x) = a_0 - 2a_1 + 2a_2 = 0 \tag{5.29a}$$

$$\lambda(k=0) = a_0 + 2a_1 + 2a_2 = 1.$$
(5.29b)

Um eine dritte Bedingung zu erhalten, welche notwendig ist um die Koeffizienten zu bestimmen, versucht man die Filterkurve bei k = 0 möglichst horizontal zu konstruieren. Dies kann mit der Forderung

$$\frac{\partial^n \lambda}{\partial k^n}\Big|_{k=0} = 0 \tag{5.30}$$

erzwungen werden. Für die erste Ableitung ergibt sich gemäss (5.28)

$$\frac{\partial \lambda}{\partial k} = -2a_1 \Delta x \sin(k\Delta x) - 4a_2 \Delta x \sin(2k\Delta x),$$

womit

$$\left. \frac{\partial \lambda}{\partial k} \right|_{k=0} = 0$$

für jede Wahl von a_0 und a_1 erfüllt ist. Also kann die Forderung gestellt werden, dass die zweite Ableitung bei k = 0 verschwinden soll. Es ergibt sich

$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial k^2} = -2a_1 (\Delta x)^2 \cos(k \Delta x) - 8a_2 (\Delta x)^2 \cos(2k \Delta x)$$

und

$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial k^2} \bigg|_{k=0} = (\Delta x)^2 \Big[-2a_1 - 8a_2 \Big] .$$

Damit diese Ableitung verschwindet, muss das Gleichungssystem (5.29) um

$$-2a_1 - 8a_2 = 0 \tag{5.31}$$

ergänzt werden. Die Lösung von (5.29,6.31) ergibt dann

$$a_2 = -1/16$$
, $a_1 = 1/4$, $a_0 = 1 - 6/16$,

womit das ideale Filter zweiter Ordnung folgendermassen aussieht:

$$\widetilde{\phi}_{j}^{(2)} = \phi_{j} + \frac{\mu}{16} \left(-\phi_{j-2} + 4\phi_{j-1} - 6\phi_{j} + 4\phi_{j+1} - \phi_{j+2} \right).$$
(5.32)

Die dazugehörige Response-Funktion $\lambda(k)$ lautet gemäss (5.28)

$$\lambda(k) = 5/8 + 1/2\cos(k\,\Delta x) - 1/8\cos(2\,k\,\Delta x) . \qquad (5.33)$$

Diese wird wiederum in Fig.5.5 grafisch dargestellt.

Die Figur zeigt auch die Responsefunktion des idealen Filters der 3. Ordnung. Letzteres kann ganz analog wie das Filter der 2. Ordnung konstruiert werden kann, wobei sogar verlangt werden kann dass die 3. und 4. Ableitung bei k=0 verschwinden. Die mit den Filtern höherer Ordnung erzielte Verbesserung der Skalenselektion geht aus der Figur deutlich hervor.



Fig.5.5: Response functionen λ und λ^{1000} der idealen Filter mit Ordnung n=1, 2 und 3