

Das Upstream-Spline Advektionsverfahren

Michael Schröter

Version 1.0, 25. Februar 1999

Zusammenfassung

Dokumentation des Upstream-Spline Advektionsverfahrens. Es behandelt die allgemeine Berechnung des Splines und die Berechnung im speziellen bei Verwendung bestimmter Randbedingungen. Zusätzlich wird die Lösung tridiagonaler linearer Gleichungssysteme vorgestellt. Abschließend wird ein selektiver Filter vorgestellt, der es ermöglicht sogenannte 2Δ -Instabilitäten, welche zum Beispiel bei der Upstream-Spline Advektion künstlich angeregt werden, auszufiltern.

Gesucht ist die Lösung der Advektionsterme in prognostischen Gleichungen, welche hier für eine allgemeine Größe ψ und die Raumrichtung x formuliert:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -u\frac{\partial\psi}{\partial x} \quad (1)$$

lauten. Ist die advehierende Geschwindigkeit u konstant, so entspricht die Lösung von (1) der Verlagerung von ψ um die Distanz $u \cdot \Delta t$ innerhalb des Zeitintervalls Δt . Die numerische Lösung von (1) setzt eine konstante Verlagerungsgeschwindigkeit während eines Zeitschritts Δt voraus. Entspricht die Verlagerungsdistanz $u \cdot \Delta t$ nicht dem ganzzahligen Vielfachen der numerischen Gitterweite, so ist die Anwendung eines Interpolationsverfahrens notwendig, um Werte von ψ zwischen den Maschenpunkten zu erhalten.

Der Unterschied zu anderen Advektionsverfahren, wie zum Beispiel dem *Upstream-Verfahren* oder dem Verfahren von *Piacsek und Williams*, bei denen zur Beschreibung der Advektion eine Approximation von Differenzenquotienten vorgenommen wird, liegt darin, daß bei dem *Upstream-Spline Advektionsverfahren* die Strömung durch eine interpolierende Funktion angenähert wird. Als interpolierende Funktion setzt das *Upstream-Spline Advektionsverfahren* eine kubische Splinefunktion s_Δ an. Es handelt sich dabei um eine Funktion, die auf jedem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}]$, mit $i = 0, \dots, N - 1$, zweimal stetig differenzierbar sind und dort mit einem Polynom dritten Grades übereinstimmen. Eine Splinefunktion ist somit stückweise aus N kubischen Polynomen so zusammengesetzt, daß die Funktion s_Δ selbst und ihre beiden ersten Ableitungen an den Stellen x_i , mit $i = 1, \dots, N - 1$, keine Sprungstellen besitzen (STOER, 1972). D. h. an den Randpunkten der Teilintervalle werden die Splinefunktionen $s_{\Delta,i}$ durch folgende Beziehungen

miteinander verknüpft:

$$\begin{aligned} s_{\Delta,i}(x_i) &= s_{\Delta,i+1}(x_i) \\ s'_{\Delta,i}(x_i) &= s'_{\Delta,i+1}(x_i) \quad \text{für } i = 0, \dots, N-1 \\ s''_{\Delta,i}(x_i) &= s''_{\Delta,i+1}(x_i) . \end{aligned}$$

$s_{\Delta,i}(x_i)$ ist hier die auf dem i -ten Teilintervall gültige Splinefunktion und x_i sind die Knotenpunkte (Stützstellen) des Splines. Sie entsprechen den Knotenpunkten des numerischen Gitters in die jeweilige betrachtete Raumrichtung.

Unter Verwendung der Steigungen der Splinefunktionen m_i , kann die Splinefunktion als

$$\begin{aligned} s_{\Delta}(x) &= m_{i-1} \frac{(x_i - x)^2 (x - x_{i-1})}{h_i^2} - m_i \frac{(x - x_i)^2 (x_i - x)}{h_i^2} \\ &\quad + \psi_{i-1} \frac{(x_i - x)^2 [2(x - x_i) + h_i]}{h_i^3} + \psi_i \frac{(x - x_{i-1})^2 [2(x_i - x) + h_i]}{h_i^3} \end{aligned} \quad (2)$$

formuliert werden (AHLBERG et al., 1967), mit $h_i = x_i - x_{i-1} = dx_i$. Für die advehierte Größe an einem Gitterpunkt i zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ gilt dann:

$$\psi_i^{t+\Delta t} = s_{\Delta}^t(x + \alpha_i \Delta x), \quad (3)$$

mit $\alpha_i = u_i \frac{\Delta t}{\Delta x}$. Für $u_i \geq 0$ erhält man durch Einsetzen von $x - \alpha_i$ in (2):

$$\psi_i^{t+\Delta t} = \psi_i^t - m_i \alpha + \left[3(\psi_{i-1}^t - \psi_i^t) + 2m_i + m_{i-1} \right] \alpha^2 \quad (4)$$

$$- \left[m_i + m_{i-1} + 2(\psi_{i-1}^t - \psi_i^t) \right] \alpha^3 . \quad (5)$$

Für $u_i < 0$ folgt mit $x + \alpha_i$ (der Spline wird hier zwischen den Punkten x_i und $x_i + 1$ ausgewertet):

$$\psi_i^{t+\Delta t} = \psi_i^t + m_i \alpha + \left[3(\psi_i^t - \psi_{i+1}^t) + 2m_i + m_{i+1} \right] \alpha^2 \quad (6)$$

$$- \left[m_i + m_{i+1} + 2(\psi_i^t - \psi_{i+1}^t) \right] \alpha^3 . \quad (7)$$

Unter der Voraussetzung, daß die Splinefunktionen an ihren Rändern stetig ineinander übergehen, ergibt sich folgende Bestimmungsgleichung für die Steigungen m_i :

$$\frac{1}{h_i} m_{i-1} + 2 \left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} \right) m_i + \frac{1}{h_{i+1}} m_{i+1} = 3 \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_i^2} + 3 \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_{i+1}^2} . \quad (8)$$

Für i gilt hier $i = 1, \dots, N-1$. Mit

$$\lambda_i = \frac{h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}, \quad (9)$$

$$\mu_i = 1 - \lambda_i, \quad (10)$$

$$c_i = 3 \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_i^2} + 3 \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_{i+1}^2} \quad (11)$$

folgt

$$\lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} = c_i . \quad (12)$$

Die Ränder des Modellgebietes müssen eine gesonderte Untersuchung erfahren. Hierzu ist die Formulierung von Randbedingungen notwendig, wobei zwischen lateralen und vertikalen Randbedingungen unterschieden werden muß. Lateral werden in der LES meist zyklische Randbedingungen angesetzt. Der Index i läuft hier nicht von 0 bis N , sondern es gilt $i = -1, \dots, nx + 1$ (für x -Richtung). Es gilt:

$$\psi_{-1} = \psi_{nx} \quad \text{und} \quad \psi_0 = \psi_{nx+1} .$$

In vertikaler Richtung muß hingegen zwischen Neumannschen und Dirichletschen Randbedingungen unterschieden werden. Der Laufindex für die vertikale Richtung bewegt sich in den Grenzen $0 \leq i \leq nz$ und es gilt:

1. Neumann-Ränder:

$$\frac{\partial \psi_{0,nz}}{\partial x_i} = 0$$

2. Dirichlet-Ränder:

$$\psi_{0,nz} = \psi_0 = \text{const}$$

Jede Wahl der Randbedingung wirkt sich anders auf die Bestimmung der Splinekoeffizienten m_i aus, wie im folgenden erläutert wird.

Nichtperiodische Randbedingungen, Advektion in vertikaler Richtung

Für nichtperiodische Splinefunktionen (Neumann oder Dirichlet Randbedingungen) ist die Angabe zweier zusätzlicher Randbedingungen für c und $i = 0$ bzw. $i = nz$ notwendig:

$$\begin{aligned} 2m_0 + \mu_0 m_1 = c_0 \quad \text{für} \quad i = 0 \\ \lambda_{nz} m_{nz-1} + 2m_{nz} = c_{nz} \quad \text{für} \quad i = nz \end{aligned} \quad (13)$$

mit

$$\mu_0 = \lambda_{nz} = 1$$

und

$$c_0 = 3 \frac{\psi_1 - \psi_0}{h_1} \quad \text{bzw.} \quad c_{nz} = 3 \frac{\psi_{nz} - \psi_{nz-1}}{h_{nz}} . \quad (14)$$

Dies gilt jedoch nur unter der Voraussetzung, daß die Krümmungen der Ausgangsfunktion $\psi''(x)$ bzw. der Splinefunktionen $s''_{\Delta}(x)$ an den Rändern verschwinden. Für $i = 1, \dots, nz - 1$ gilt weiterhin:

$$c_i = 3\lambda_i \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_i} + 3\mu_i \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_{i+1}} . \quad (15)$$

Die einzige Unbekannte sind hier die Steigungen der Splinefunktionen m_i . Zu ihrer Bestimmung ist die Lösung des folgenden linearen Gleichungssystems notwendig:

$$\begin{aligned}
2m_0 &+ \mu_0 m_1 &= c_0 \\
\lambda_1 m_0 &+ 2m_1 + \mu_1 m_2 &= c_1 \\
&\vdots &= \vdots \\
\lambda_{nz} m_{nz-1} &+ 2m_{nz} &= c_{nz}
\end{aligned} \tag{16}$$

bzw.

$$\begin{pmatrix} 2 & \mu_0 & & & \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{nz-1} & 2 & \mu_{nz-1} \\ & & & \lambda_{nz} & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{nz-1} \\ m_{nz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{nz-1} \\ c_{nz} \end{pmatrix} \tag{17}$$

(leere Plätze stehen für Nullen). Bei diesem linearen Gleichungssystem ist die Koeffizientenmatrix eine Tridiagonalmatrix mit konstanten Koeffizienten, die ausschließlich von der Struktur des verwendeten Modellgitters abhängen (siehe (9) und (10)).

Periodische Randbedingungen, Advektion in lateraler Richtung

Für zyklische laterale Randbedingungen (periodischer Splineansatz) kann (12) für $i = 0$ und $i = nx$ vollständig formuliert werden:

$$\begin{aligned}
\lambda_0 m_{-1} &+ 2m_0 + \mu_0 m_1 &= c_0 \\
\lambda_1 m_0 &+ 2m_1 + \mu_1 m_2 &= c_1 \\
&\vdots &= \vdots \\
\lambda_{nx} m_{nx-1} &+ 2m_{nx} + \mu_{nx} m_{nx+1} &= c_{nx}
\end{aligned} \tag{18}$$

Unter Verwendung der Bedingungen für den zyklischen Rand

$$s_{\Delta}(x_{-1}) = s_{\Delta}(x_{nx}), \quad m_{-1} = m_{nx}, \quad s_{\Delta}(x_{nx+1}) = s_{\Delta}(x_0), \quad m_{nx+1} = m_0$$

kann (18) zu

$$\begin{aligned}
\lambda_0 m_{nx} &+ 2m_0 + \mu_0 m_1 &= c_0 \\
\lambda_1 m_0 &+ 2m_1 + \mu_1 m_2 &= c_1 \\
&\vdots &= \vdots \\
\lambda_{nx} m_{nx-1} &+ 2m_{nx} + \mu_{nx} m_0 &= c_{nx}
\end{aligned} \tag{19}$$

umgeschrieben werden, was dem Lösen von

$$\begin{pmatrix} 2 & \mu_0 & & & \lambda_0 \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{nx-1} & 2 & \mu_{nx-1} \\ \mu_{nx} & & & \lambda_{nx} & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{nx-1} \\ m_{nx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{nx-1} \\ c_{nx} \end{pmatrix} \tag{20}$$

äquivalent ist. Wie auch für den nichtperiodischen Fall sind hier die Koeffizienten der Matrix nur von der Struktur des numerischen Gitters abhängig, jedoch ist die Koeffizientenmatrix keine Tridiagonalmatrix mehr, wodurch sich der Aufwand für die Lösung des Gleichungssystems erhöht.

Lösen der linearen Gleichungssysteme

Sowohl im periodischen als auch im nichtperiodischen Fall kann die Koeffizientenmatrix vor jeder Simulation einmal zur Verfügung gestellt werden und für den Rest der Simulation unverändert bleiben. In PALM-1 geschieht die Bereitstellung der Koeffizientenmatrix nach der Überprüfung der Eingabeparameter (`check_parameters.f90`) in dem Unterprogramm `init_advec.f90`

Die Koeffizientenmatrix im nichtperiodischen Fall

Für tridiagonale Gleichungssysteme verringert sich der Rechenaufwand für das Standard-Gauß-Lösungsverfahren (Thomasalgorithmus). Ausgangspunkt für diesen Algorithmus ist das folgende lineare Gleichungssystem:

$$\mathbf{A}_{(nz+1) \times (nz+1)} \cdot \vec{m} = \vec{c} . \quad (21)$$

Dem Standard-Gauß-Lösungsverfahren folgend wird zunächst die Matrix $\mathbf{A}_{(nz+1) \times (nz+1)}$ in eine linke untere Dreiecksmatrix $\mathbf{L}_{(nz+1) \times (nz+1)}$ und eine rechte obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R}_{(nz+1) \times (nz+1)}$ zerlegt. Da $\mathbf{A}_{(nz+1) \times (nz+1)}$ eine Tridiagonalmatrix ist und alle Elemente außer den Diagonal-, Subdiagonal- und Superdiagonalelementen gleich 0 sind, sind bei den Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{R} auch nur die Diagonal- und Subdiagonal bzw. die Diagonal- und Superdiagonalelemente von 0 verschieden. Die Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{R} nehmen deshalb folgende einfache Gestalt an:

$$\mathbf{L}_{(nz+1) \times (nz+1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & & \\ l_1 & 1 & \ddots & & & \\ & l_2 & 1 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & & l_{nz} & 1 \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{R}_{(nz+1) \times (nz+1)} = \begin{pmatrix} d_0 & r_0 & & & & \\ 0 & d_1 & r_1 & & & \\ & \ddots & d_2 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & r_{nz-1} & \\ & & & 0 & d_{nz} & \end{pmatrix} .$$

Die Zerlegung der Matrix kann, wie bereits angesprochen, einmalig vor Beginn der eigentlichen Simulationen vorgenommen werden (`init_advec.f90`), wobei sich die Koeffizienten wie folgt berechnen:

$$d_0 = a_{0,0} \quad (22)$$

$$r_i = a_{i,i+1} \quad \text{mit } i = 0, \dots, nz - 1 \quad (23)$$

$$l_i = \frac{c_i}{d_{i-1}} \quad \text{mit } i = 1, \dots, nz \quad (24)$$

$$d_i = a_{i,i} - a_{i-1,i} \cdot l_i \quad \text{mit } i = 1, \dots, nz \quad (25)$$

Gelöst wird das Gleichungssystem (21) nun in zwei Schritten, denn es gilt:

$$A_{(nz+1) \times (nz+1)} \cdot \vec{m} = L_{(nz+1) \times (nz+1)} \underbrace{R_{(nz+1) \times (nz+1)} \cdot \vec{m}}_{=: \vec{y}} = \vec{c}$$

$$\text{Schritt 1:} \quad L_{(nz+1) \times (nz+1)} \cdot \vec{y} = \vec{c}$$

$$\text{Schritt 2:} \quad R_{(nz+1) \times (nz+1)} \cdot \vec{m} = \vec{y}.$$

Die Koeffizientenmatrix im periodischen Fall

Im periodischen Fall handelt es sich bei der Matrix $A_{(nx+1) \times (nx+1)}$ um eine sogenannte zyklische Tridiagonalmatrix der Form:

$$A_{(nx+1) \times (nx+1)} = \begin{pmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & 0 & 0 & \cdots & \beta \\ a_{1,0} & a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & a_{nx-1,nx-1} & a_{nx-1,nx} \\ \alpha & 0 & \cdots & 0 & a_{nx,nx-1} & a_{nx,nx} \end{pmatrix}, \quad (26)$$

mit $\alpha = \mu_{nx}$ und $\beta = \lambda_0$.

Gleichungssysteme dieser Form können mit Hilfe der SHERMAN-MORRISON Formel (PRESS et al., 1986) gelöst werden, dabei gilt es zwei lineare Gleichungssysteme zu lösen:

$$A_{(nx+1) \times (nx+1)} \cdot \vec{y} = \vec{b}, \quad (27)$$

$$A_{(nx+1) \times (nx+1)} \cdot \vec{z} = \vec{u}. \quad (28)$$

Die endgültige Lösung \vec{m} ergibt sich anschließend zu:

$$\vec{m} = \vec{y} - \left(\frac{\vec{v} \cdot \vec{y}}{1 + (\vec{v} \cdot \vec{z})} \right) \vec{z}. \quad (29)$$

Die Vektoren \vec{u} und \vec{v} sind dabei wie folgt definiert:

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \vec{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta/\alpha \end{pmatrix}.$$

Filterung der Daten auf 2Δ -Instabilitäten

Die Verwendung des Upstream-Spline Advektionsverfahrens hat zur Folge, daß sich unrealistische, numerisch bedingte 2Δ -Instabilitäten ausbilden können. Um diese auszufiltern werden die advektiven Änderungen der prognostischen Variablen im Anschluß an die Berechnung der Advektion in die jeweilige Raumrichtung einer Filterung auf diese 2Δ -Instabilitäten unterzogen. Es wird ein sogenannter selektiver Filter von MAHRER und PIELKE (1978) angewendet. Die ungefilterte Größe ϕ und die gefilterte Größe ϕ^* müssen dabei folgendes inhomogene, lineare Gleichungssystem mit symmetrischer, diagonaldominanter, tridiagonaler Koeffizientenmatrix erfüllen:

$$(1 - \delta) \phi_{i-1}^* + 2(1 + \delta) \phi_i^* + (1 - \delta) \phi_{i+1}^* = \phi_{i-1} + 2 \phi_i + \phi_{i+1} \quad (36)$$

(der Laufindex i möge für die Betrachtungen von 0 bis n laufen). Der Wert des Glättungsfaktors bestimmt dabei, inwieweit von der Filterung auch Störungen mit Wellenlängen größer als 2Δ betroffen sind. Damit diese aber, da nicht numerisch bedingt, möglichst unbeeinflusst bleiben sollen, sollte der Glättungsfaktor so klein wie möglich gewählt werden ($0 < \delta \leq 0.1$).

Ein Problem bei der Filterung stellen die Randpunkte des Modellgebietes (0 und n) dar, da man für sie das Gleichungssystem (36) nicht formulieren kann. Läßt man die Randpunkte jedoch ungefiltert, so gilt:

$i = 1$:

$$2(1 + \delta) \phi_1^* + (1 - \delta) \phi_2^* = \delta \phi_0 + 2 \phi_1 + \phi_2$$

$1 \leq i \leq n$:

$$(1 - \delta) \phi_{i-1}^* + 2(1 + \delta) \phi_i^* + (1 - \delta) \phi_{i+1}^* = \phi_{i-1} + 2 \phi_i + \phi_{i+1} \quad (37)$$

$i = n - 1$:

$$2(1 + \delta) \phi_{n-1}^* + (1 - \delta) \phi_n^* = \phi_{n-1} + 2 \phi_{n-1} + \delta \phi_n$$

Gelöst wird dieses Gleichungssystem mit dem bereits beschriebenen Thomasalgorithmus.

Tests haben gezeigt, daß die Wirkung des Filters abhängig von der Anzahl der betrachteten Gitterpunkte, jedoch unabhängig von der Formulierung für die Randpunkte ist.

Ablauf in PALM-1

Die Umsetzung des Upstream-Spline Advektionsverfahrens in Verbindung mit der Filterung auf 2Δ -Instabilitäten wird durch das Flußdiagramm in Abbildung 1 verdeutlicht.

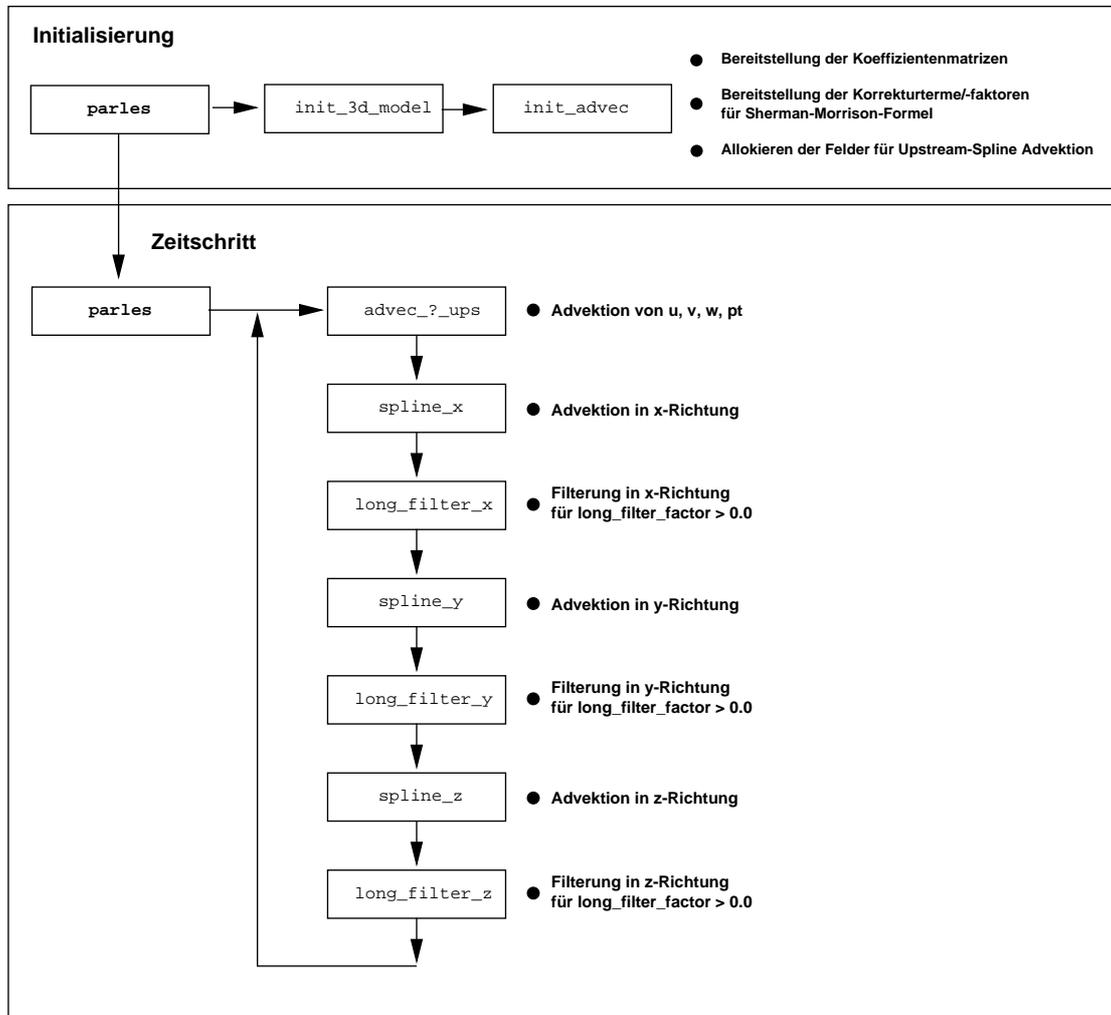


Abbildung 1: Ablaufplan für das Upstream-Spline Advektionsverfahren

Literatur

Ahlberg, J. H., E. N. Nilson, J. L. Walsh, 1967: *The theory of splines and their applications*. — Academic Press, New York/London, 284 S.

Mahrer, Y., R. A. Pielke, 1978: A test of an upstream spline interpolation technique for the advective terms in a numerical mesoscale model. — *Mon. Wea. Rev.*, **106**, 818–830.

Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, 1986: *Numerical recipes in Fortran: the art of scientific computing*. — Cambridge University Press, Cambridge, zweite Aufl., 963 S.

Price, G. V., A. K. MacPherson, 1973: A numerical weather forecasting method using cubic splines on a variable grid. — *Mon. Wea. Rev.*, **12**, 1102–1113.

Stoer, J., 1972: *Einführung in die Numerische Mathematik I*. — Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York, 250 S.