Formulierung der Randbedingungen in genesteten numerischen Simulationsmodellen

Ingolf Aschenbrenner

Diplomarbeit 1998

Institut für Meteorologie und Klimaforschung Universität Karlsruhe/Forschungszentrum Karlsruhe

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung					
2	Nur	neriscl	he Methoden	7		
	2.1	1 Differenzenverfahren				
	2.2	Einsei	tige Differenzen	7		
	2.3	Stabili	itätskriterium	8		
	2.4	Zentri	erte Differenzen	8		
	2.5	Absch	neidefehler	8		
	gerung der Phasengeschwindigkeit durch numerische Appro- rung	10				
	2.7	Interpolation bei Gitternetzen mit unterschiedlicher Maschenweite 1				
2.8 Lineare Interpolation in der Ebene						
3	Offe	ene Rä	nder und genestete Gebiete	17		
	3.1	Nume	Numerische Behandlung offener Ränder			
		3.1.1	Extrapolation \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	17		
		3.1.2	Ausstrahlung	22		
		3.1.3	Dämpfung	26		
		3.1.4	Konstanter Dämpfungskoeffizient	28		
		3.1.5	Variabler Dämpfungskoeffizient	29		
	3.2	3.2 Verfahren der Nestung von Modellgebieten				
		3.2.1	Anpassung der Funktionswerte	31		
		3.2.2	Anpassung der Zeittendenzen	33		
		3.2.3	Die Strahlungsbedingung am genesteten Rand	34		
4	Das	Verha	alten von Wellen am offenen und genesteten Rand	37		
	4.1	Reflexion am festen Rand 33				
	4.2	Reflexion an einem über die Ausstrahlungsbedingung spezifiziertenRand3				
	4.3	Disper Einfal	rsion der Advektionsgeschwindigkeit bei nicht-senkrechtem	42		
	4.4	Auswi	rkungen der Dispersion auf die Ausstrahlungsbedingung $\ .$.	43		

	Reflexion an einer Dämpfungsschicht	46						
		4.5.1 Behandlung einer Teilschicht	46					
		4.5.2 Erweiterung auf die gesamte Dämpfungsschicht	50					
		4.5.3 Lange Wellen	52					
		4.5.4 Kurze Wellen	54					
		4.5.5 Unterdrückung kurzwelliger Störungen	57					
	4.6	Das Verhalten der Anpassungsschicht gegenüber einem äußeren Antrieb	62					
	4.7	Verringerung der Phasengeschwindigkeit in der Anpassungsschicht	65					
	4.8	Das Randverhalten von positiv definiten Wellen	67					
5	Übe	bertragung der Randbedingungen auf numerische Modelle 68						
	5.1	Ein eindimensionales Flachwassermodell $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	68					
	5.2	Der unterschiedliche Charakter von Differentialgleichungen \ldots 6						
	5.3	Das dreidimensionale meteorologische Modell KAMM $\ .\ .\ .\ .$	70					
		5.3.1 Die Behandlung der Topographie im KAMM	70					
		5.3.2 Randbedingungen der Geschwindigkeitskomponenten $\ .$.	72					
		5.3.3 Druckrandbedingungen	73					
	5.4	Spezielle Probleme zweidimensionaler Simulationsgebiete \ldots .						
	5.5	Probleme an den Ecken rechtwinkliger Simulationsgebiete 7						
6	Pro	ogrammdokumentation 7						
	6.1	Anpassungen im Hauptprogramm haupt2.f						
	6.2	Das Unterprogramm einricht						
	6.3	Das Unterprogramm rand	88					
7	\mathbf{Erg}	ebnisse von Modellrechnungen	95					
	7.1	Methoden der Verifikation von Randbedingungen	95					
	7.2	Beschreibung der Prüf- und Auswerteverfahren						
	7.3	3 Verwendete Rand- und Nestungsbedingungen						
		7.3.1 Nestung durch Überschreiben des Randes	98					
		7.3.2 Strahlungsbedingung	98					
		7.3.3 Anpassungsschicht	99					
	7.4	Überprüfung der Randbedingungen im Flachwassermodell	99					

9	Lite	eraturv	verzeichnis	120
8	8 Zusammenfassung			
		7.5.5	Anwendungsbeispiel: Bergüberströmung	111
		7.5.4	Randbedingungen der Temperatur	110
		7.5.3	Randbedingungen der Windkomponenten	108
		7.5.2	Randbedingungen von Wasserdampf und Flüssigwassergehal	t106
		7.5.1	Beschreibung der Test-Konfigurationen \hdots	104
	7.5	Überp	rüfung der Randbedingungen im KAMM	104
		7.4.2	Abhängigkeit von der Wellenlänge	102
		7.4.1	Abhängigkeit von der Courantzahl	99

1 Einleitung

Bei der numerischen Simulation atmosphärischer Vorgänge mithilfe von dreidimensionalen Strömungsmodellen stellt sich in den Geowissenschaften häufig das Problem der Festlegung und Behandlung der seitlichen Ränder des Modellgebietes. Die untere Begrenzung ist in der Regel nämlich durch den Erdboden oder den Meeresgrund von außen vorgegeben und stellt damit eine feste, für das Fluid undurchdringliche Grenze dar. Für die obere Berandung stehen ebenfalls natürliche, wenn auch elastische Grenzflächen in Form des Phasenüberganges von Wasser zu Luft bzw. einer fiktiven "Obergrenze" der Atmosphäre zur Verfügung. Die seitlichen Ränder werden demgegenüber willkürlich festgesetzt und fallen deshalb in der Regel nicht mit natürlichen, d.h. orographischen Diskontinuitäten zusammen.¹ Dem Wesen nach handelt es sich dabei um *offene Ränder*, weil eine Durchströmung dieser künstlichen Grenzflächen, denen in der wirklichen Landschaft gar keine Diskontinuitäten entsprechen, unbedingt zugelassen werden muß. Die Randbedingungen prognostischer Systeme müssen derart gewählt werden, daß möglichst keinerlei unerwünschten numerischen Effekte auftreten:

- Die seitlichen Ränder des Modellgebietes sollen idealerweise *keine Quellen* der Modellparameter darstellen.
- An der Grenzfläche soll *keine Reflexion* von wellenartigen Gebilden stattfinden, die vom Inneren des Modellgebietes auf die Berandung zulaufen.
- Die numerische Lösung des Systems soll sich im gesamten Modellgebiet so verhalten, als wären die künstlichen Begrenzungen nicht vorhanden.

Diese Bedingungen stehen allerdings mit der mathematischen Theorie im Widerspruch, welche besagt, daß die Lösung von Differentialgleichungen im allgemeinen sowohl von den Anfangs- als auch von den Randbedingungen abhängt. Aus diesem Grunde sind Kompromisse unvermeidbar, denn man wird wohl kaum eine ideale Lösung dieses Problems erwarten dürfen.

Wenn das Modell auch Einflüssen aus angrenzenden Gebieten unterliegen soll, die vorhandenen Rechnerressourcen eine Vergrößerung des Simulationsgebietes bei gleichbleibender räumlicher Auflösung aber nicht zulassen, so kann man sich unter Verwendung eines *genesteten Modells* behelfen. Dabei werden zwei Modelle mit unterschiedlicher räumlicher Auflösung eingesetzt. Das den zentralen, inneren Bereich abdeckende Modell wird mit einer dichteren Folge von Gitterpunkten abgedeckt. Ein weiteres Modell mit üblicherweise derselben Gesamtzahl an Gitterpunkten, aber mit einer größeren, z.B. der doppelten Schrittweite, überdeckt

¹Das Problem seitlicher Ränder erübrigt sich selbstverständlich bei der Verwendung globaler Modelle.

dann einen breiteren Ausschnitt des Gebietes. Das innere, feinere Modell soll vollständig im gesamten, gröberen Modell enthalten sein. Beide Modelle können prinzipiell unabhängig voneinander betrieben werden. Dadurch bietet sich vor allem die gleichzeitige Verarbeitung auf jeweils einem Knoten eines Parallelrechners an. Wenn die Anzahl der Gitterpunkte beider Modelle übereinstimmt, ist für eine ideale Auslastung der parallelen Prozesse gesorgt, da beide Knoten in jedem Zeitschritt annähernd dieselbe Arbeit verrichten müssen.

- Bei der Nestung wird im Inneren eines großen, den gesamten Raum von Interesse überspannenden Gebietes ein zusätzliches kleineres, aber räumlich besser aufgelöstes (d.h. mit geringerer Gitterweite, also kleinerem Abstand benachbarter Gitterpunkte) plaziert.
- In diesem zentralen Bereich laufen beide Modelle nebeneinander.
- Als Ergebnisse nimmt man die als genauer angesehenen Werte des besser aufgelösten Gebietes.

Für ein derartiges Vorgehen lassen sich die folgenden Gründe anführen: Speziell ist man zwar nur an den Ergebnissen im zentralen Bereich interessiert (es würde dafür also das innere Gebiet für sich alleine bereits genügen), man möchte jedoch auch Einflüsse von weiter außen zulassen. Allerdings wäre der Ressourcenverbrauch (d.h. Speicherplatz sowie für einen kompletten Rechenschritt benötigte Zeit) zu groß, wenn die höhere räumliche Auflösung des inneren Gebietes über den gesamten Bereich hinweg zur Anwendung käme. Stattdessen bedient man sich der eben beschriebenen Form der Nestung der beiden Gebiete. Bezüglich des Verbrauchs an Ressourcen sei ein Beispiel zur Verdeutlichung angefügt: Beträgt der Faktor der unterschiedlichen räumlichen Auflösung beider Gebiete den Wert Zwei, so ist bei gleicher Anzahl der Gitterpunkte in beiden Gebieten² das äußere Gebiet vom horizontalen Umfang her doppelt so groß wie das innere. Soll das äußere Gebiet hingegen dieselbe Gitterpunkt dichte wie das innere aufweisen, dann würde sich die Anzahl der Gitterpunkte gleichzeitig vervierfachen. Bei der beschriebenen Form der Nestung (unter Parallelausführung) wird aber lediglich die doppelte Rechen(Speicher-)Kapazität benötigt. Dies entspricht einer Verringerung der in Anspruch genommenen Ressourcen um 50 %.

Wegen der Überlappung beider Modelle sind auf diese Weise für das innere Gebiet gleich zwei Lösungen mit verschiedener Schrittweite vorhanden, von denen selbstverständlich derjenigen mit der besseren Auflösung vertraut wird. Aus Bequemlichkeitsgründen wird darauf verzichtet, beim gröberen, den gesamten Bereich abdeckenden Modell den zentralen Bereich auszusparen, den bereits das

²Bei Parallelausführung des Programms ist es vorteilhaft, wenn beide Gebiete dieselbe Anzahl an Gitterpunkten aufweisen; dies führt nämlich zu einer optimalen, d.h. annähernd gleichen Auslastung beider Knoten des Parallelrechners, auf denen jeweils die Berechnung eines der beiden Gebiete erfolgt.

sowieso feinere, innere Modell abdeckt.³ Es muß nun allerdings noch dafür gesorgt werden, daß an den Schnittstellen der beiden Modelle eine Übertragung von Informationen vom einen Gebiet in das jeweils andere erlaubt wird. Berücksichtigt man dabei nur Einflüsse der äußeren Bereiche auf das zentrale, innere Gebiet, so spricht man von *Einfacher Nestung* oder *Einweg-Nestung*. Sollen auch Rückwirkungen des inneren Bereiches auf das gesamte, gröbere Modell in Betracht gezogen werden, handelt es sich um ein System mit *Zweiwege-Nestung*.

An dieser Stelle sei nun noch ein kurzer Ausblick auf die folgenden Kapitel gestattet:

- Im Kapitel 2 werden zunächst die wichtigsten, für den weiteren Verlauf benötigten numerischen Grundlagen zusammengestellt. Unter anderem wird dabei auch der wichtige Begriff der *Courantzahl* eingeführt.
- Im Kapitel 3 werden die verschiedenen numerischen Methoden zur Behandlung offener und genesteter Ränder von Simulationsgebieten eingeführt.
- Nachdem jetzt sämtliche benötigten Begriffe und Methoden bekannt sind, erfolgt im Kapitel 4 nun eine eingehende analytische Behandlung des Verhaltens von Wellen am offenen und genesteten Rand.
- Die im Kapitel 4 erlangten theoretischen Kenntnisse über das Verhalten von Wellen am offenen und genesteten Rand verlangen nun nach einer Verifizierung am numerischen Modell. Hierzu werden im Kapitel 5 zunächst die verwendeten Modelle, ein eindimensionales *Flachwassermodell* sowie das komplexe, dreidimensionale *KAMM* (*Karlsruher Atmosphärisches Mesoskali*ges *M*odell), vorgestellt und auf zu beachtende Besonderheiten in der Handhabung dieser beiden Modelle hingewiesen.
- Das meteorologische Modell KAMM ist in der Programmiersprache FOR-TRAN realisiert. Normalerweise dient es lediglich der Simulation abgeschlossener, also voneinander unabhängiger Gebiete. Um die Einrichtung von genesteten Gebieten zu ermöglichen, bedarf es deshalb einer geringfügigen Ergänzung des Hauptprogrammes sowie einiger zusätzlicher Unterprogramme. Im Kapitel 6 folgt ein mit Erläuterungen versehener Abdruck der Modifizierungen des Programmtextes.
- Das abschließende Kapitel 7 liefert die mit dem einfachen Flachwassermodell sowie dem komplexeren meteorologischen Modell KAMM erzielten Resultate. Nach einer separaten Untersuchung der verschiedenen Strömungsparameter erfolgt als Test für das Zusammenwirken sämtlicher Bestandteile des Modelles ein realitätsnahes Beispiel: die Überströmung einer Bodenwelle.

³Auf einem Parallelrechner brächte ein solches Vorgehen überhaupt keinen Vorteil, da durch Verringerung der Zahl der Gitterpunkte des gröberen Modells die Synchronisierung beider Knoten verlorenginge.

2 Numerische Methoden

In diesem Kapitel werden zunächst die wichtigsten, für den weiteren Verlauf benötigten numerischen Grundlagen zusammengestellt. Unter anderem wird dabei auch der wichtige Begriff der Courantzahl eingeführt.

2.1 Differenzenverfahren

Eine allgemeine prognostische Gleichung einer eindimensionalen Funktion f(x, t) sei von folgender Form:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \operatorname{fct}\left(x, t, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \ldots\right)$$
(1)

Zur numerischen Behandlung dieser Differentialgleichung wird zunächst der Definitionsbereich der Funktion mittels eines Gitters konstanter Schrittweite diskretisiert. Dieses Verfahren erfordert nun die Ersetzung der Differentiale durch Differenzenquotienten. Dabei finden zwei Möglichkeiten Verwendung:

- Einseitige Differenzen
- Zentrierte Differenzen

2.2 Einseitige Differenzen

Die Bildung einseitiger Differenzen erfolgt unter Verwendung zweier auf der Raum- oder Zeitachse nebeneinander liegenden Funktionswerten. Für die Ableitung einer Funktion f nach der Zeit folgt z.B.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} \longrightarrow \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} \tag{2}$$

Der Übersichtlichkeit halber wird eine Indexschreibweise verwendet. f_i^n bedeutet den Wert der Funktion f am Punkt mit der Koordinate $x = i \Delta x$ zur Zeit $t = n \Delta t$.

Die Bildung einseitiger Differenzen hat gegenüber dem Differential eine größte Abweichung linearer Ordnung O(t), was bei Bildung der zugehörigen Taylor-Entwicklung ersichtlich ist [Bronstein und Semendjajew (1991)]:

$$f(t + \Delta t) = f(t) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}\Delta t + O(\Delta t^2)$$
(3)

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t} + O(\Delta t) \tag{4}$$

Bei Verwendung einseitiger räumlicher Differenzen tritt allerdings das Problem der Zuordnung des Wertes des Differenzenquotienten zu einem Gitterpunkt auf, weswegen sie praktischerweise nur bei der Advektion Verwendung finden (Aufwind- bzw. Abwindschema).

2.3 Stabilitätskriterium

Bei der Advektion läßt sich auch sehr gut zeigen, daß nicht jede Kombination von räumlicher Gitterweite Δx und Zeitschritt Δt automatisch zu numerisch stabilen Lösungen führt. Es ist vielmehr zu beachten, daß sich mit Phasengeschwindigkeiten $c > \Delta x / \Delta t$ fortbewegende Strukturen vom numerischen Modell nicht mehr korrekt erfaßt werden können. Dies führt zu dem sogenannten Courant-Stabilitätskriterium (manchmal auch: Courant-Friedrichs-Lewy-Stabilitätskriterium). Der Betrag der *Courant-Zahl Cou* = $c\Delta t / \Delta x$ [Davies (1983), Kantha et al. (1990), Lehmann (1993)] ist demzufolge nach oben hin begrenzt:

$$\left| c \, \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| \le 1 \tag{5}$$

Die Abbildung 1 stellt einen Schnitt durch den aus dieser Aussage resultierenden "Ausbreitungskegel" dar: Nur die innerhalb dieses – räumlich zu verstehenden – Kegels verlaufenden Trajektorien gehören zu numerisch stabilen Lösungen der zugrundeliegenden Differentialgleichung.

2.4 Zentrierte Differenzen

Zentrierte Differenzen überspannen jeweils zwei Gitterpunkte und sind von quadratischer Genauigkeit in der Variablen, nach der abgeleitet wird. Sie stellen den Wert der betreffenden Ableitung am mittleren Punkt dar, auch wenn dessen eigener Funktionswert nicht unbedingt selbst in die Differenzenbildung eingehen muß. Zentrierte Differenzen sind also den einseitigen vorzuziehen:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} \longrightarrow \frac{f_i^{n+1} - f_i^{n-1}}{2\,\Delta t} \tag{6}$$

2.5 Abschneidefehler

Die Ersetzung eines infinitesimalen Differentials df/dt durch einen Differenzenquotienten stellt selbstverständlich nur eine Approximation dar. Zwangsläufig



Abbildung 1: Schnitt durch den Ausbreitungskegel (wegen der Beschränkung auf $|Cou| \leq 1$)

muß deshalb ein mehr oder weniger ausgeprägter Unterschied zwischen der Näherung und dem tatsächlichen Wert bestehen. Diese Differenz wird als *Abschneidefehler* bezeichnet und tritt gleichermaßen bei der Verwendung einseitiger wie zentrierter Differenzen auf. Zur Darstellung des Abschneidefehlers wird eine stetige Funktion f(x) in ihre Taylor-Reihe entwickelt, die allerdings bereits nach dem quadratischen Term abgebrochen wird [Bronstein und Semendjajew (1991)]:

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(\Delta x)^2 + \dots$$
(7)

Nach dem Differential df/dx aufgelöst, ergibt sich ein im Punktegitter anwendbarer Ausdruck mit einseitigen Differenzen, der in den Modellrechnungen anstelle dieser Ableitung verwendet werden kann:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} \Delta x \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \tag{8}$$

Der bei der Approximation vernachlässigte Term (im wesentlichen handelt es sich dabei um $-d^2 f/dx^2 \Delta x/2$) stellt dann den sogenannten Abschneide- oder Abbruchfehler bei der Diskretisierung des Differentialoperators df/dx dar.

Direkt am Rand muß zur Diskretisierung der räumlichen Ableitung im Rahmen der Advektionsgleichung auf einseitige Differenzen zurückgegriffen werden; zentrierte Differenzen erforderten in diesem Fall nämlich auch den Zugriff auf außerhalb des Integrationsgebietes liegende Gitterpunkte. Eine mögliche Differenzenform von $\partial f/\partial t = -c \partial f/\partial x$ ist dann gegeben durch

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -c \, \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \tag{9}$$

Die Implementierung der Zeitableitung $\partial f/\partial t$ bereitet demgegenüber keine derartigen Probleme, weil dafür zentrierte Differenzen mit geringerem Diskretisationsfehler (quadratisch in Δt bei $\Delta t \longrightarrow 0$) zur Verfügung stehen. Der Differenzenquotient $[f(x + \Delta x) - f(x)]/\Delta x$ läßt sich durch Entwicklung in die ersten Glieder der Taylor-Reihe (7) näherungsweise als Funktion der kontinuierlichen (partiellen) Ableitungen $\partial f/\partial t$, $\partial^2 f/\partial t^2$, ... schreiben:⁴

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Delta x + \dots$$
(10)

Die Ableitungen sind dabei an einem inneren Punkt des Intervalles $[x, x + \Delta x]$ zu berechnen. Aus (9) und (10) folgt dann die kontinuierliche Entsprechung der diskretisierten Advektionsgleichung mit einseitigen räumlichen Differenzen:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -c \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{c}{2} \frac{\partial f^2}{\partial x^2} \Delta x \tag{11}$$

2.6 Verringerung der Phasengeschwindigkeit durch numerische Approximierung

Stellvertretend für komplexere zu diskretisierende partielle Differentialgleichungen sei eine reine Advektionsgleichung gemäß $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ vorgegeben. Unter Verwendung zeitlich wie räumlich zentrierter Differenzen führt dies zu der Differenzengleichung

$$f_i^{n+1} - f_i^{n-1} + c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n \right) = 0 \tag{12}$$

Es bietet sich ein Wellenansatz der Form $f_i^n(x,t) = \hat{f} \exp[i(\omega t - kx)]$ an. Setzt man dies in die diskretisierte Gleichung ein, ergibt sich [Paschen (1980)]

$$\hat{f} e^{i\left[\omega\left(t+\Delta t\right)-kx\right]} - \hat{f} e^{i\left[\omega\left(t-\Delta t\right)-kx\right]} + c\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\hat{f} e^{i\left[\omega t-k\left(x+\Delta x\right)\right]} - \hat{f} e^{i\left[\omega t-k\left(x-\Delta x\right)\right]}\right) = 0$$
(13)

⁴Alternativ dazu käme auch die Verwendung einer geeigneten Restgliedformulierung unter Berücksichtigung von einschlägigen Mittelwertsätzen in Betracht.

$$\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\,\Delta t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\,\Delta t}}{2\,\mathrm{i}} + c\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k\,\Delta x} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,\Delta x}}{2\,\mathrm{i}} = 0\tag{14}$$

$$\sin(\omega \,\Delta t) - c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \,\sin(k \,\Delta x) = 0 \tag{15}$$

Diese Gleichung läßt sich nach der Winkelgeschwindigkeit ω auflösen, wodurch sich wegen $\omega = c' k$ gleichzeitig ein Ausdruck für die Phasengeschwindigkeit c' nach durchgeführter Diskretisierung ergibt:

$$\omega \,\Delta t = \arcsin\left[c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \,\sin(k \,\Delta x)\right] \tag{16}$$

$$c' = \frac{1}{k\Delta t} \arcsin\left[c\frac{\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x)\right]$$
 (17)

In die Wellenzahl $k = 2 \pi / \lambda$ geht die Wellenlänge λ ein, die nun gemäß $\lambda = n \Delta x$ in relativen Einheiten n auf die Gitterweite Δx bezogen werden soll:

$$c' = \frac{n\Delta x}{2\pi\Delta t} \arcsin\left(c\frac{\Delta t}{\Delta x}\sin\frac{2\pi\Delta x}{n\Delta x}\right)$$
(18)

$$Cou' = \frac{n}{2\pi} \arcsin\left(Cou \sin\frac{2\pi}{n}\right)$$
 (19)

Dabei stellt $Cou' = c' \Delta t / \Delta x$ die nach erfolgter Diskretisierung herrschende Courant-Zahl dar, deren Pendant Cou entsprechend die Courant-Zahl des kontinuierlichen Systems.

Eine auf das Gitterpunktraster projizierte Welle erleidet demnach eine Veränderung ihrer Phasengeschwindigkeit dahingehend, daß in Abhängigkeit von ihrer Wellenlänge – genauer: der auf die Gitterweite Δx bezogenen relativen Wellenlänge – die Wellen langsamer werden. Für 2- Δ -Wellen mit $\lambda = 2 \Delta x$ (oder in relativen Einheiten n = 2) verschwindet c' sogar ganz; zu größeren Wellenlängen hin nimmt die Verringerung der Phasengeschwindigkeit in ihrer Intensität ab.

Nur bei Courant-Zahlen Cou in der Nähe von Eins bleibt die ursprüngliche Phasengeschwindigkeit nahezu erhalten. Für Cou = 1 gilt nämlich

$$Cou' = \frac{n}{2\pi} \arcsin\left(Cou \sin \frac{2\pi}{n}\right) = \frac{n}{2\pi} \arcsin\left(\sin \frac{2\pi}{n}\right) = \frac{n}{2\pi} \frac{2\pi}{n} = 1 = Cou$$
(20)

Dabei muß allerdings der Fall n = 2 ausgeschlossen werden, für den auch weiterhin Cou' = 0 resultiert.

Auf das Problem der Nestung zweier Gebiete mit unterschiedlicher räumlicher Auflösung übertragen, bedeutet das, daß die Phasengeschwindigkeit beider Bereiche zwar der wahren, im Kontinuum bestehenden Geschwindigkeit nachhinkt; weil diese Geschwindigkeitsverminderung bei geringer relativer Wellenlänge am größten ist, führt dies zum Auftreten einer Geschwindigkeitsdisparität der beiden Gebiete gegeneinander. Eine identische Anfangsgeschwindigkeit wird durch die ungleiche räumliche Auflösung in Form der Gitterweite Δx dahingehend modifiziert, daß sich im feinskaligen inneren Gebiet die Wellen schneller fortbewegen können als im äußeren, umfassenden Gebiet mit dementsprechend gröberer Maschenweite. Dies hat zur Folge, daß von außen in das eingebettete feinere Modell eindringende Wellen beim Übergang eine Beschleunigung erfahren, so daß sich mit zunehmander Entfernung von dieser Schnittstelle eine gleichermaßen anwachsende Phasendifferenz gegenüber der im grobskaligeren Gebiet weiterhin mitlaufenden Welle herausbildet. Bei der gewöhnlichen, nur in einer Richtung (nämlich von außen nach innen) erfolgenden Nestung ist dieser Effekt zwar unerwünscht; er stellt aber vor allem bei zusätzlich zugelassener Rückkoppelung (von innen nach außen) ein Problem dar, wenn eine durch das gesamte innere Gebiet hindurchlaufende Welle anschließend wieder nach außen tritt und dabei mit der langsameren, im gröberen Modell parallel dazu verlaufenden Welle rekombiniert wird, wobei es zu Interferenzerscheinungen kommt, weil die Kohärenz beider Wellenzüge nicht mehr gegeben ist.

In flächenhaften Simulationsgebieten erfolgt beim Übergang zwischen den Gebieten mit unterschiedlicher Gitterweite Δx aufgrund der damit verbundenen voneinander verschiedenen Phasengeschwindigkeiten in Analogie zur Optik eine *Brechung* des Wellenvektors in der Einfallsebene zum Lot hin oder vom Lot weg – je nach Richtung des Übertritts vom dichteren bzw. dünneren Medium, wobei in diesem Sinne das innere Gebiet mit der eigentlich größeren Gitterpunktdichte als "optisch dünner" bezeichnet werden muß, um die begriffliche Übereinstimmung beizubehalten (das dünnere Medium zeichnet sich im allgemeinen durch eine größere Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wellen aus).

2.7 Interpolation bei Gitternetzen mit unterschiedlicher Maschenweite

Bei der Nestung ist ein mit einem feineren Gitternetz überzogenes Gebiet in ein wesentlich größeres, aber mit geringerer räumlicher Auflösung, d.h. größerem gegenseitigen Abstand der Diskretisierungspunkte versehenes, eingebettet. Gewöhnlich erfolgt die Verknüpfung beider Gebiete an ihrer gemeinsamen Verbindungsfläche in der Weise, daß zwar Einflüsse von außen auf das genestete Gebiet zugelassen werden, aber neben diesem Antrieb des feinskaligen Modelles durch das umfassende grobskaligere keine Übergänge in umgekehrter Richtung stattfinden sollen, also Rückkoppelung nicht erlaubt ist. Eine von außen kommende Welle wechselt dann an der Schnittstelle auf ein Gebiet mit einer größeren Dichte der Diskretisationspunkte, wobei an den zusätzlich hinzukommenden Stützstellen die Funktionswerte in geeigneter Weise interpoliert werden müssen. Beim verwendeten Modell KAMM (eine Beschreibung desselben folgt in Kapitel 5) sind üblicherweise im genesteten Gebiet pro Längeneinheit gerade doppelt so viele Gitterpunkte vorhanden wie im grobmaschigeren, dafür aber den gesamten Simulationsbereich übergreifenden. Das Verhältnis der Gitterweiten beider Gebiete zueinander beträgt dann $\Delta x/\Delta x = 2$, und zwischen jeweils zwei Punkten x_0 und $x_1 = x_0 + \Delta x$ des äußeren Gebietes, an denen Werte $f_0 := f_0$ bzw. $f_1 := f_1$ bekannt sind, liegt mittig genau ein weiterer Punkt des genesteten Gebietes, dessen Funktionswert $f_{1/2}$ noch festzulegen ist. Am einfachsten geschieht dies durch lineare Interpolation gemäß $f_{\alpha} = \alpha f_0 + (1-\alpha) f_1$, wobei hier wegen der Lage des zu interpolierenden Punktes genau in der Mitte zwischen den beiden Stützstellen $\alpha = 1/2$ gewählt werden muß. Die lineare Interpolation stellt dann nichts anderes dar als eine gewöhnliche arithmetische Mittelung zweier Funktionswerte [Shapiro (1978)]:

$$f_{1/2} = \frac{1}{2} f_0 + \left(1 - \frac{1}{2}\right) f_1 = \frac{1}{2} \left(f_0 + f_1\right) = \bar{f}$$
(21)

Eigentlich würde man beim Übergang einer Welle von einem gröberen Gitter auf ein feineres mit zusätzlich hinzukommenden Stützstellen, an denen die Funktion diskretisiert ist, keinerlei Informationsverlust erwarten, weil sämtliche Diskretisationspunkte des äußeren Modelles doch im genesteten Gebiet ebenfalls vorhanden und auch mit identischen Werten besetzt sind. Tatsächlich erfahren die Wellen aber eine Modifizierung ihrer Amplitude sowie im allgemeinen Fall auch eine Phasenverschiebung gegenüber der im alles umfassenden, gröberen Gitternetz mitlaufenden Originalwelle. Um dies zu zeigen, sei der Funktionsverlauf einer beliebig gearteten Welle in die dazugehörigen Fourierkomponenten zerlegt. An den Diskretisationsstellen gilt dann (mit den Wellenzahlen k_n und den Phasenverschiebungen φ_n):

$$f_0 = \sum_n \hat{f}_n \sin(k_n x_0 + \varphi_n) \tag{22}$$

$$f_1 = \sum_{n} \hat{f}_n \sin(k_n x_1 + \varphi_n) = \sum_{n} \sin[k_n (x_0 + \Delta x) + \varphi_n)]$$
(23)

Aus diesen Werten an den Stützstellen x_0 und $x_1 = x_0 + \Delta x$ läßt sich anschließend der interpolierte Wert $f_{1/2} = 1/2 (f_0 + f_1)$ ermitteln:

$$f_{1/2} = \frac{1}{2} \left(\sum_{n} \hat{f}_{n} \sin(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) + \sum_{n} \hat{f}_{n} \sin[k_{n} (x_{0} + \Delta x) + \varphi_{n}] \right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n} \hat{f}_{n} [\sin(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) + \sin(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) \cos(k_{n} \Delta x) + \cos(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) \sin(k_{n} \Delta x)]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n} \hat{f}_{n} \left\{ \left[1 + \cos\left(2\frac{k_{n} \Delta x}{2}\right) \right] \sin(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) + \sin\left(2\frac{k_{n} \Delta x}{2}\right) \cos(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n} \hat{f}_{n} \left[\left(1 + \cos^{2} \frac{k_{n} \Delta x}{2} - \sin^{2} \frac{k_{n} \Delta x}{2} \right) \sin(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) + + 2 \sin \frac{k_{n} \Delta x}{2} \cos \frac{k_{n} \Delta x}{2} \cos(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) \right]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n} \hat{f}_{n} \left(2 \cos^{2} \frac{k_{n} \Delta x}{2} \cos(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) + 2 \sin \frac{k_{n} \Delta x}{2} \cos \frac{k_{n} \Delta x}{2} \cos(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) \right)$$

$$= \sum_{n} \hat{f}_{n} \cos \frac{k_{n} \Delta x}{2} \left(\cos \frac{k_{n} \Delta x}{2} \sin(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) + \sin \frac{k_{n} \Delta x}{2} \cos(k_{n} x_{0} + \varphi_{n}) \right)$$

$$= \sum_{n} \hat{f}_{n} \cos \frac{k_{n} \Delta x}{2} \sin \left[k_{n} \left(x_{0} + \frac{\Delta x}{2} \right) + \varphi_{n} \right]$$

$$= \sum_{n} \hat{f}_{n} \cos \frac{k_{n} \Delta x}{2} \sin(k_{n} x_{1/2} + \varphi_{n})$$

$$= \sum_{n} \hat{f}_{n} \sin(k_{n} x_{1/2} + \varphi_{n})$$
(24)

An den zusätzlich hinzugekommenen Gitterpunkten wird die Welle demnach nur mit um den Faktor $\hat{f}'_n/\hat{f}_n = \cos(k_n \Delta x/2)$ gedämpfter Amplitude übernommen. Die Dämpfung ist im Bereich der kürzesten Wellen besonders ausgeprägt. Die sogenannten 2- Δ -Wellen, deren Wellenlänge $\lambda = 2 \Delta x$ gerade der doppelten Gitterweite entspricht, verschwinden wegen $k = 2 \pi/\lambda = 2 \pi/(2 \Delta x) = \pi/\Delta x$ und $\cos(k \Delta x/2) = \cos(\pi/2) = 0$ sogar ganz. Es muß an dieser Stelle betont werden, daß demgegenüber an den gemeinsamen, in beiden Gebieten vorhandenen Stützstellen selbstverständlich *keine* derartige Dämpfung der Amplitude auftritt (dort wird ja zu jedem Zeitpunkt der Funktionswert des äußeren Gebietes vollständig übernommen). Folglich wird durch diesen Effekt der zu übertragenden Originalwelle eine stehende 2- Δ -Welle mit der Amplitude $|\hat{f}_n - \hat{f}'_n| = \hat{f}_n [1 - \cos(k_n \Delta x/2)]$ überlagert. Diese störende Oszillierung läßt sich nur durch zusätzliche Anwendung von geeigneten Glättungsoperatoren vermeiden, welche die davon am stärksten betroffenen kürzesten Wellen aus dem Spektrum der Wellenlängen herausfiltern und somit unschädlich machen.

2.8 Lineare Interpolation in der Ebene

Sei in Erweiterung der eindimensionalen linearen Interpolation ein äquivalentes Gitternetz in der Ebene vorgegeben. Der Punkt (x,y) liege innerhalb eines durch die vier Eckpunkte (0,0), (0,1), (1,0) und (1,1) aufgespannten Quadrates $(0 \leq$ $x, y \leq 1$). Sein Funktionswert soll in Abhängigkeit von den Werten an diesen Stützpunkten ausgedrückt werden. Im eindimensionalen Fall ($0 \leq x \leq 1$ mit den Stützwerten f(0) und f(1)) berechnet sich der gewichtete Mittelwert zu

$$f(x) = \alpha_0 f(0) + \alpha_1 f(1) = (1 - x) f(0) + x f(1)$$
(25)

Die auftretenden Gewichte α_i ergeben in ihrer Summe $\alpha_0 + \alpha_1 = (1 - x) + x = 1$. Dieses Resultat läßt sich ohne weiteres auf den zweidimensionalen Fall übertragen, wenn dabei die x- und y-Koordinaten zunächst separat behandelt werden:

$$f(x,y) = (1-x) f(0,y) + x f(1,y)$$

= $(1-x) [(1-y) f(0,0) + y f(0,1)] + x [(1-y) f(1,0) + y f(1,1)]$
= $(1-x) (1-y) f(0,0) + (1-x) y f(0,1) + x (1-y) f(1,0) + x y f(1,1)$
= $\alpha_{0,0} f(0,0) + \alpha_{0,1} f(0,1) + \alpha_{1,0} f(1,0) + \alpha_{1,1} f(1,1)$ (26)

Zur Kontrolle kann wieder die Summe der Gewichte $\alpha_{i,j}$ herangezogen werden, die genau wie im eindimensionalen Fall wieder Eins ergeben muß:

$$\alpha_{0,0} + \alpha_{0,1} + \alpha_{1,0} + \alpha_{1,1} = (1-x)(1-y) + (1-x)y + x(1-y) + xy = (1-x) + x = 1$$
(27)

Bis jetzt erfolgte die Betrachtung anhand eines idealisierten Gitternetzes mit identischen, auf Eins normierten Punkteabständen in beiden Koordinatenrichtungen. Nun sollen unterschiedliche Gitterweiten in x- und y-Richtung zugelassen werden, die zusätzlich beliebige Werte annehmen können.⁵ Das Eingangsproblem stellt sich dann in leicht abgewandelter Form wie folgt dar: Ein Punkt mit den Koordinaten (x,y) liegt innerhalb des von den vier Punkten $(x_0,y_0), (x_0,y_1), (x_1,y_0)$ und (x_1,y_1) aufgespannten Rechteckes; sein Funktionswert f(x,y) ist linear zu interpolieren, d.h. in Abhängigkeit von den Werten an den vier Stützpunkten darzustellen. Um diesen erweiterten, allgemeinen Fall zu behandeln, bedarf es lediglich einer (wiederum linearen) Variablentransformation. Die Koordinaten xund y sind dabei in Gleichung (26) durch die folgenden Ausdrücke zu ersetzen:

$$x := \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}
 y := \frac{y - y_0}{y_1 - y_0}
 (28)$$

⁵Derartig verallgemeinerte Gitternetze sollen im Hinblick auf Kapitel 6, wo die programmiertechnische Realisierung genesteter Gebiete im Mittelpunkt steht, ausdrücklich erlaubt sein.

Diese Ersetzung ist notwendig, damit die modifizierten Koordinaten auf das normierte Einheitsquadrat (0,0)-(1,1) abgebildet werden. Die Gleichung (26) lautet schließlich

$$f(x,y) = \left(1 - \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right) \left(1 - \frac{y - y_0}{y_1 - y_0}\right) f(0,0) + \left(1 - \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right) \frac{y - y_0}{y_1 - y_0} f(0,1) + + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \left(1 - \frac{y - y_0}{y_1 - y_0}\right) f(1,0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \frac{y - y_0}{y_1 - y_0} f(1,1) = \frac{(x_1 - x) (y_1 - y) f(0,0) + (x_1 - x) (y - y_0) f(0,1)}{(x_1 - x_0) (y_1 - y_0)} + + \frac{(x - x_0) (y_1 - y) f(1,0) + (x - x_0) (y - y_0) f(1,1)}{(x_1 - x_0) (y_1 - y_0)} = \alpha_{0,0} f(0,0) + \alpha_{0,1} f(0,1) + \alpha_{1,0} f(1,0) + \alpha_{1,1} f(1,1)$$
(29)

Die Kontrollberechnung der Summe der Gewichte $\alpha_{i,j}$ ergibt wieder

$$\alpha_{0,0} + \alpha_{0,1} + \alpha_{1,0} + \alpha_{1,1} = \frac{(x_1 - x)(y_1 - y) + (x_1 - x)(y - y_0)}{(x_1 - x_0)(y_1 - y_0)} + \frac{(x - x_0)(y_1 - y_0) + (x - x_0)(y - y_0)}{(x_1 - x_0)(y_1 - y_0)} = \frac{(x_1 - x)(y_1 - y_0) + (x - x_0)(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)(y_1 - y_0)} = 1$$
(30)

Folglich kann die vorgeschlagene Erweiterung der linearen Interpolation auf den zweidimensionalen Fall ohne weiteres zur Anwendung gelangen. Jedem beliebigen Punkt einer Gitternetzebene (der nicht notwendigerweise selbst einen Gitterpunkt darstellen muß, obwohl dieser Fall natürlich auch zugelassen ist) können so in eindeutiger Weise vier benachbarte Gitterpunkte zugeordnet werden, deren Anteil am Funktionswert des ausgewählten Punktes sich aus dem Verhältnis der gegenseitigen Abstände zu diesen Referenzpunkten ergibt.

3 Offene Ränder und genestete Gebiete

In diesem Kapitel werden die verschiedenen numerischen Methoden zur Behandlung offener und genesteter Ränder von Simulationsgebieten eingeführt. Die dabei im folgenden durchweg angewandte Bezeichnung der Werte an den einzelnen Gitterpunkten des Randbereiches ist der Abbildung 2 zu entnehmen. Der Index b soll in Anlehnung an die Literatur stets dem Randwert (engl. boundary) vorbehalten sein.

	\tilde{f}_{b-4}		\tilde{f}_{b-2}		\tilde{f}_b	\tilde{f}_{b+2}	\tilde{f}_{b+4}
	\Diamond	+	\Leftrightarrow	+	\Leftrightarrow	\diamond	\diamond
	+	+	+	+	+		
	\Diamond	+	\Diamond	+	\Leftrightarrow	\diamond	\diamond
grobes Gitter \diamond	+	+	+	+	+		
	\Leftrightarrow	+	\diamond	+	\Leftrightarrow	\diamond	\diamond
	+	+	+	+	+		
	\Diamond	+	\Leftrightarrow	+	\Leftrightarrow	\diamond	\diamond
	f_{b-4}	f_{b-3}	f_{b-2}	f_{b-1}	f_b		

Abbildung 2: Verwendete Notation im Randbereich des genesteten Gebietes

3.1 Numerische Behandlung offener Ränder

3.1.1 Extrapolation

Am Randpunkt mit der Ortskoordinate x_b können die prognostischen Gleichungen in Differenzenform nur mit einseitigen Differenzen angewandt werden. Diese spezielle Behandlung am Rand des Modellgebietes erfordert aber zusätzlichen Programmieraufwand. Eine einfachere Behandlung des Randproblems besteht deshalb darin, den Funktionswert am Rand, der aus dem eben genannten Grund nicht über die prognostischen Gleichungen berechnet werden kann, mithilfe der Funktionswerte an den benachbarten Punkten weiter innen zu ermitteln. Dies geschieht am einfachsten durch Extrapolation der Funktionswerte vom Inneren des Gebietes her.

$$f_b^{n+1} = f_{b-1}^n \tag{31}$$

Falls f_b einen konstanten Wert annimmt, z.B. $f_b \equiv 0$, so bedeutet dies bei reinen Wellensystemen Knoten einer stehenden Welle (durch Überlagerung zweier gegenläufiger Wellen) am Rand, was zu vollständiger gegenphasiger Reflexion führt, die nicht wünschenswert ist. Wird dagegen

$$f_b^{n+1} = f_{b-1}^{n+1} \tag{32}$$

gewählt, also zu jedem Zeitpunkt dem Randpunkt der Funktionswert des einen Schritt weiter innen liegenden Punktes zugeordnet, ist die Ableitung der Funktion am Rand df/dx = 0, und es liegt ein Extremum von f vor. Eine äquivalente Beschreibung hinsichtlich eines Wellensystems wäre in diesem Fall ein offener Rand mit vollständiger gleichphasiger Reflexion. Dieser Zustand ist ebenfalls nicht befriedigend. Gesucht wird demnach eine genauere Extrapolation, bei der auch Funktionswerte von weiter innen liegenden Punkten zur Verwendung kommen. Soll zu einem festen Zeitpunkt nur in der Ortskoordinate extrapoliert werden, so bietet sich dafür beispielsweise ein ganzrationales Interpolationspolynom an. Die Anzahl k der verwendeten Stützpunkte bestimmt den Grad k-1des Polynoms. Als Stützwerte werden die Funktionswerte der vom Randpunkt aus gelegenen k nächsten Punkte des Gebietes zu dem gewählten Zeitpunkt verwendet. Das auf diese Art gebildete, eigentlich zur Interpolation von Funktionswerten gedachte Polynom wird daraufhin zur Extrapolation des Funktionswertes am Randpunkt verwendet. Die folgende Zusammenstellung listet die Ergebnisse der Polynome niedrigster Ordnung auf.

Extrapolation mit konstantem Wert (entspricht Polynom nullter Ordnung):

$$f_b^{n+1} = f_{b-1}^{n+1} \tag{33}$$

Lineare Interpolation (mittels Polynom erster Ordnung):

$$f_b^{n+1} = 2 f_{b-1}^{n+1} - f_{b-2}^{n+1}$$
(34)

Quadratische Interpolation (mittels Polynom zweiter Ordnung):

$$f_b^{n+1} = 3 f_{b-1}^{n+1} - 3 f_{b-2}^{n+1} + f_{b-3}^{n+1}$$
(35)

Kubische Interpolation (mittels Polynom dritter Ordnung):

$$f_b^{n+1} = 4 f_{b-1}^{n+1} - 6 f_{b-2}^{n+1} + 4 f_{b-3}^{n+1} - f_{b-4}^{n+1}$$
(36)

Zur raschen Überprüfung der Auswirkungen der verwendeten Randbedingung bietet sich ein einfaches Modell an, das auf der Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{37}$$

beruht und deshalb nur Lösungen in Form von sich mit der konstanten Geschwindigkeit *c* ausbreitenden Wellen enthält.⁶ Es liegt keine bevorzugte Ausbreitungsrichtung vor, so daß bei Auftreten einer Störung sich gleichermaßen nach beiden Seiten hin Wellen ausbilden. Dieses einfache hyperbolische System ist höchst empfindlich gegenüber der Wahl der Randbedingungen. Wird die Behandlung der Ränder des Gebietes nicht sorgfältig genug durchgeführt, so kann eine mehr oder weniger bedeutende reflektierte Welle auftreten. Für die numerische Überprüfung der Randbedingungen anhand dieses einfachen Systems kommt folgende, aus der kontinuierlichen Wellengleichung abgeleitete Differenzengleichung zur Verwendung:

$$f_i^{n+1} - 2f_i^n + f_i^{n-1} = c^2 \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \left(f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n \right)$$
(38)

Mit $Cou = c \Delta t / \Delta x$ ergibt sich nach Umformung zu einer prognostischen Gleichung

$$f_i^{n+1} = 2f_i^n - f_i^{n-1} + Cou^2 \left(f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n \right)$$
(39)

Als Ergebnis dieser Simulation zeigt sich, daß reine räumliche Extrapolation, d.h. Bildung des Funktionswertes am Randpunkt zu einem bestimmten Zeitpunkt als Linearkombination der Funktionswerte desselben Zeitpunktes von benachbarten Gitterpunkten weiter innen immer zu vollständiger Reflexion unter Beibehaltung der Amplitude einer von Inneren zum Rand hin einfallenden Welle führt. Ist das verwendete Interpolationspolynom von gerader Ordnung, so erfolgt die Reflexion in Phase; wird hingegen mit einem Interpolationspolynom ungerader Ordnung extrapoliert, dann kehrt sich die Phase um. Da ein System betrachtet wird, bei dem die Orts- und die Zeitkoordinate über die konstante Phasengeschwindigkeit c fest miteinander verbunden sind (anderenfalls könnte keine Propagation auftreten), wird eine Form der Extrapolation zu bevorzugen sein, bei der zur Linearkombination die Funktionswerte sowohl an verschiedenen nebeneinander liegenden Gitterpunkten als auch zu unterschiedlichen aufeinander folgenden Zeitpunkten Verwendung finden. Diese Verbindung von räumlich weiter innen liegenden Gitterpunkten und den dortigen, zeitlich zurückliegenden Funktionswerten ist hinsichtlich des zusätzlich benötigten Speicherplatzes für einige frühere Zeitpunkte gemäß folgendem Schema praktikabel:

 $^{^{6}}$ Auf dieser Gleichung beruht auch das *Flachwassermodell*, auf das in Kapitel 7 mehrfach Bezug genommen wird; eine ausführlichere Beschreibung dieses eindimensionalen Modelles folgt in Kapitel 5; hier soll daher diese knappe Einführung genügen.

$$f_b^{n+1} = k_1 f_{b-1}^n + k_2 f_{b-2}^{n-1} + k_3 f_{b-3}^{n-2} + \dots$$
(40)

Der Funktionswert am Randpunkt x_b soll von derselben Größenordnung sein wie die Funktionswerte der Gitterpunkt im Inneren des Gebietes. Aus diesem Grund muß für die reellen Vorfaktoren k_i gelten:

$$\sum_{i} k_i = k_1 + k_2 + k_3 + \ldots = 1 \tag{41}$$

Diesem Schema liegen folgende Überlegungen zugrunde:

- Es dürfen in der linearen Kombination nicht die Funktionswerte eines Gitterpunktes zu verschiedenen Zeitpunkten nebeneinander auftauchen, weil dadurch die strenge Kausalität des prognostischen Systems, das im Inneren des Gebietes Geltung findet, verletzt würde.
- Das System im Inneren läßt die Propagation von Wellen mit konstanter Geschwindigkeit zu; folglich besteht ein Zusammenhang zwischen Funktionswerten, deren zeitlicher und räumlicher Abstand in einem festen Verhältnis zueinander stehen.

In den niedrigsten Ordnungen ergeben sich im einzelnen die folgenden Linearkombinationen. Die Koeffizienten und deren Vorzeichen sind dabei jeweils von den entsprechenden Gleichungen (33)–(36) übernommen worden. Geändert hat sich im Vergleich dazu lediglich, daß nun mit jedem Schritt vom Randpunkt weg zugleich auch ein Zeitschritt zurück stattfindet. Dadurch erhält die Extrapolation einen advektiven Charakter. Man könnte deshalb also auch von einer "diagonalen Extrapolation" im x-t-Raum sprechen – zuvor beschränkte sich die Extrapolation hingegen lediglich auf die Ortskoordinate. Zur Verdeutlichung mag hierbei noch einmal die Abbildung 1 (Seite 9) dienen.⁷

Extrapolation mit konstantem Wert (entspricht Polynom nullter Ordnung):

$$f_b^{n+1} = f_{b-1}^n \tag{42}$$

Lineare Extrapolation (mittels Polynom erster Ordnung):

$$f_b^{n+1} = 2 f_{b-1}^n - f_{b-2}^{n-1} \tag{43}$$

⁷Dieses Vorgehen steht übrigens in engem Zusammenhang mit der im weiteren Verlauf dieses Kapitels noch zu besprechenden Strahlungsrandbedingung und entspräche in der dortigen Terminologie einer Erweiterung der Fälle mit (festen) Courantzahlen Cou = 0 bzw. |Cou| = 1 auf mehrere Gitterpunkte.

Quadratische Extrapolation (mittels Polynom zweiter Ordnung):

$$f_b^{n+1} = 3 f_{b-1}^n - 3 f_{b-2}^{n-1} + f_{b-3}^{n-2}$$
(44)

Kubische Extrapolation (mittels Polynom dritter Ordnung):

$$f_b^{n+1} = 4 f_{b-1}^n - 6 f_{b-2}^{n-1} + 4 f_{b-3}^{n-2} - f_{b-4}^{n-3}$$
(45)

Die Simulation mit einer reinen Wellengleichung zeigt auch in diesem Fall hinsichtlich der Phasenverschiebung dieselben Ergebnisse wie oben. Bei Verwendung einer ungeraden Anzahl von Stützstellen zur Interpolation erfolgt gleichphasige Reflexion, wohingegen im anderen Fall eine Welle gegenphasig reflektiert wird. Allerdings tritt jetzt zusätzlich eine Verringerung der Amplitude der reflektierten Welle und damit eine Dämpfung auf. Dabei richtet sich die Stärke dieser Dämpfung nach der Anzahl der bei der Interpolation verwendeten Stützstellen. Die Hinzunahme jeder weiteren zusätzlichen Stützstelle verbessert die Dämpfung um einen Faktor r. Der genaue Wert dieses Faktors hängt von den numerischen Kenngrößen der Simulation ab. Wie zuvor schon gezeigt, ändert sich bei rein räumlicher Extrapolation mit einem konstanten Wert die Amplitude der reflektierten Welle gegenüber der zum Rand hin einfallenden Welle nicht. In diesem Fall wäre die Zahl der verwendeten Stützstellen k = 1. Wird mithilfe von k Stützstellen ein Interpolationspolynom k-1-ten Grades gebildet und damit die Extrapolation des Funktionswertes am Randpunkt durchgeführt, so gilt für die dadurch erhaltene Dämpfung R(k) in Form des Verhältnisses der Amplituden von reflektierter und einfallender Welle demnach näherungsweise folgende Formel:

$$R(k) \approx r^{k-1} \tag{46}$$

Durch die Hinzunahme weiterer Stützstellen bei der Bildung des Interpolationspolynoms kann die Dämpfung also erheblich verbessert werden. Jedoch wird die geringere Reflektivität des Randes mit einem enormen zusätzlichen Speicherbedarf erkauft. Sinnvollerweise wird man die Vor- und Nachteile abwägen und einen vernünftigen Kompromiß schließen müssen. Eigentlich genügt schon eine geringere Reduktion der Amplitude der reflektierten Welle, wenn man davon ausgeht, daß die Welle am anderen Ende des Gebietes in derselben Weise gedämpft wird. Durch mehrfaches Durchlaufen des Gebietes wird die Amplitude der hin- und herlaufenden Welle mit der Zeit ebenfalls beliebig gut vermindert.

Oben wurden hinsichtlich der Extrapolation zwei Extreme betrachtet. Bei rein zeitlicher Extrapolation mit einem konstanten Wert gemäß $f_b^{n+1} = f_b^n$ wird eine zum Rand hin laufende Welle unter Phasenumkehr vollständig ins Innere zurückreflektiert, d.h. gespiegelt. Rein räumliche, konstante Extrapolation über $f_b^{n+1} = f_{b-1}^{n+1}$ führt hingegen zu einer Reflexion unter Beibehaltung der Phase

der Welle. Diese beiden Ergebnisse sind selbstverständlich keinesfalls optimal. Wünschenswert ist vielmehr ein Resultat, bei dem die zurückkehrende Welle – sofern überhaupt existent – gegenüber der zum Rand hin einfallenden mehr oder weniger stark gedämpft wird, d.h. eine geringere Amplitude aufweist. Offensichtlich muß bei Anwendung einer Randbedingung mit Extrapolation eine Linearkombination aus zeitlich zurückliegenden und gleichzeitig räumlich weiter innen liegenden Funktionswerten aufgestellt werden:

$$f_b^{n+1} = \alpha f_b^n + (1 - \alpha) f_{b-1}^{n+1} \tag{47}$$

Der in dieser Konvexkombination auftretende Koeffizient α mit dem Wertebereich $0 \leq \alpha \leq 1$ bestimmt die "Erinnerung" des Funktionswertes am Randpunkt an den Wert einen Zeitschritt zuvor und stellt damit eine Art "Trägheit" des Randpunktes dar. Bei $\alpha = 0$ wird der vorherige Funktionswert komplett "vergessen", und es erfolgt eine vollständige Anpassung an den neuen Funktionswert des Nachbarpunktes. Demgegenüber verändert sich der Funktionswert am Randpunkt bei $\alpha = 1$ überhaupt nicht. Welcher Wert für α im speziellen Fall zu wählen ist, hängt von der lokal gültigen Courant-Zahl $c \Delta t / \Delta x$ ab. Gilt $c \Delta t / \Delta x = 0$, ist also die Strömungsgeschwindigkeit c = 0, herrscht also überhaupt keine Fortbewegung, dann ist eine "träge" Randbedingung mit $\alpha = 1$ am geeignetsten. Bewegt sich das Strömungsmuster hingegen in jedem Zeitschritt um genau einen Gitterpunkt weiter – was dem Stabilitätskriterium entsprechend die maximal zulässige Geschwindigkeit darstellt –, so ist die Wahl eines "trägheitslosen" Randes mit $\alpha = 0$ am besten. Insgesamt besteht zwischen der Courant-Zahl $c \Delta t / \Delta x$ und dem optimalen Koeffizient α ein linearer Zusammenhang gemäß

$$\alpha = 1 - c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \tag{48}$$

Mit diesem, am besten geeigneten Wert für α lautet die Extrapolation zur Bestimmung des neuen Funktionswertes am Rand

$$f_b^{n+1} = c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \, f_{b-1}^{n+1} + \left(1 - c \,\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \, f_b^n \tag{49}$$

Derartige Linearkombinationen mit vom Strömungszustand abhängigen und damit variablen Koeffizienten werden im folgenden Abschnitt bei den Strahlungsrandbedingungen näher behandelt.

3.1.2 Ausstrahlung

An den seitlichen Rändern sollen keine Reflexionen auftreten. Auf den Rand zulaufende Gebilde sollen von der Schnittstelle derart verarbeitet werden, daß sie – wie in Wirklichkeit auch – vollständig aus dem Gebiet herauslaufen. Um diesen Effekt zu erhalten, bietet es sich an, direkt am Rand die prognostischen Gleichungen lokal durch eine reine Advektionsgleichung zu ersetzen. Weil dabei von einer vollständigen "Ausstrahlung" des auf den Rand zulaufenden Gebildes ausgegangen wird, spricht man gewöhnlich von einer *Strahlungsrandbedingung* [Durran et al. (1993), Hedley und Yau (1988), Hedstrom (1979), Israeli und Orszag (1981), Kantha et al. (1990), Miller und Thorpe (1981), Orlanski (1976), Pearson (1974), Raymond und Kuo (1984)]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \tag{50}$$

Zwar existiert im Idealfall keine reflektierte Welle; im stationären Zustand nach dem Durchgang eines seitlich begrenzten Gebildes kann sich als zulässige Lösung der Advektionsgleichung aber ein räumlich homogener Zustand mit konstanten, jedoch nicht unbedingt verschwindenden Werten der Modellparameter einstellen. Wenn das Modell im Inneren des Gebietes ebenfalls eine derartige räumlich homogene Lösung erlaubt (ohne Dämpfung durch Reibung), so ist bei der Bewertung der Funktionalität der speziellen Randbedingung auch dieser konstante Funktionswert zu berücksichtigen.

Die Phasengeschwindigkeit c am Rand berechnet sich dann zu

$$c = -\frac{\partial f/\partial t}{\partial f/\partial x} \tag{51}$$

Bei der Differenzenbildung bestehen verschiedene Möglichkeiten; eine Auswahl davon ist im folgenden aufgeführt.

Zeitlich und räumlich zentriert um $t = n \Delta t$ und x_{b-1} :

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^{n+1} - f_{b-1}^{n-1}}{f_{b-2}^n - f_b^n}$$
(52)

Zeitlich zentriert um $t = n \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_b :

$$c = -\frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_b^{n+1} - f_b^{n-1}}{f_{b-1}^n - f_b^n}$$
(53)

Zeitlich zentriert um $t = n \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_{b-1} :

$$c = -\frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^{n+1} - f_{b-1}^{n-1}}{f_{b-2}^n - f_{b-1}^n}$$
(54)

Zeitlich zentriert um $t = (n-1) \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_{b-1} :

$$c = -\frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^n - f_{b-1}^{n-2}}{f_{b-2}^{n-1} - f_{b-1}^{n-1}}$$
(55)

Es besteht noch eine weitere Möglichkeit der Berechnung der zeitlich zentrierten Phasengeschwindigkeit. Die zeitliche Zentrierung des Differenzenquotienten um n + 1/2 wird durch die Interpolation der Funktionswerte zu den Zeitpunkten n und n + 1 erreicht:

$$c = -\frac{f_b^{n+1} - f_b^n}{\frac{1}{2} \left(f_b^n + f_b^{n+1}\right) - \frac{1}{2} \left(f_{b-1}^n + f_{b-1}^{n+1}\right)}$$
(56)

Zeitlich einseitig bei $t = (n+1) \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_{b-1} :

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^{n+1} - f_{b-1}^n}{f_{b-2}^{n+1} - f_{b-1}^{n+1}}$$
(57)

Zeitlich einseitig bei $t = n \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_{b-1} :

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^{n+1} - f_{b-1}^n}{f_{b-2}^n - f_{b-1}^n}$$
(58)

Zeitlich einseitig bei $t = n \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_b :

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_b^n - f_b^{n-1}}{f_{b-1}^n - f_b^n}$$
(59)

Zeitlich einseitig bei $t = (n-1) \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_{b-1} :

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^n - f_{b-1}^{n-1}}{f_{b-2}^{n-1} - f_{b-1}^{n-1}}$$
(60)

Zeitlich einseitig bei $t = (n-1) \Delta t$ und räumlich einseitig bei x_b :

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_b^n - f_b^{n-1}}{f_{b-1}^{n-1} - f_b^{n-1}}$$
(61)

Nur bei c > 0 erfolgt eine Bewegung von innen zum Rand hin. Sinnvollerweise wird man als Phasengeschwindigkeit nur solche positiven Werte zulassen, da anderenfalls durch die Randbedingung verursachte Störungen ins Innere des betrachteten Gebietes zurücklaufen könnten. Berücksichtigt man zusätzlich das auf jeden Fall einzuhaltende Courantsche Stabilitätskriterium, so folgt für die Courant-Zahl $c \Delta t / \Delta x$ die einschränkende Bedingung

$$0 \le c \, \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1 \tag{62}$$

In der bekannten Differenzenschreibweise lautet die Advektionsgleichung mit einseitigen Differenzen in der Zeit- und Ortskoordinate

$$f_b^{n+1} = f_b^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(f_b^n - f_{b-1}^n \right)$$
$$= \left(1 - c \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) f_b^n + c \frac{\Delta t}{\Delta x} f_{b-1}^n$$
(63)

Dies ist eine Linearkombination von Funktionswerten der dem Rand benachbarten Punkte zu früheren Zeitpunkten. Die Vorfaktoren hängen nun allerdings im Gegensatz zur reinen Extrapolation von den Gegebenheiten der Strömung ab und sind damit zeitlich variabel.

Soll die Advektionsgleichung durch über jeweils zwei Schrittweiten zentrierte Differenzen angenähert werden, so ist dabei zu beachten, daß dies nicht am Randpunkt mit x_b selbst, sondern nur einen Gitterpunkt weiter innen bei $x_{b-1} = x_b - \Delta x$ möglich ist, weil der Punkt mit $x_{b+1} = x_b + \Delta x$, der zur Bildung der räumlich zentrierten Differenzen hinsichtlich der Ableitungen nach der Ortskoordinate benötigt wird, nicht definiert ist. Die Advektionsgleichung lautet damit in Differenzenschreibweise bei räumlicher wie zeitlicher Zentrierung

$$f_b^{n+1} - f_b^{n-1} = -c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \,\left(f_b^{n+1} - f_{b-2}^{n+1}\right) \tag{64}$$

Diese Gleichung läßt sich vereinfachen, indem in folgender Weise entlang der Diagonalen in der x-t-Ebene extrapoliert wird:

$$f_{b-2}^{n+1} = 2 f_{b-1}^n - f_b^{n-1} \tag{65}$$

Die Linearkombination erfolgt nun mit nur zwei zu kombinierenden Funktionswerten wie zuvor bei der Verwendung einseitiger Differenzen:

$$f_b^{n+1} - f_b^{n-1} = -c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \,\left(f_b^{n+1} - 2 \,f_{b-1}^n + f_b^{n-1}\right) \tag{66}$$

Diese implizite Gleichung muß noch nach der zu berechnenden Größe f_b^{n+1} aufgelöst werden:

$$\left(1+c\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)f_b^{n+1} = \left(1-c\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)f_b^{n-1} + 2c\frac{\Delta t}{\Delta x}f_{b-1}^n \tag{67}$$

$$f_b^{n+1} = \frac{1 - c \frac{\Delta t}{\Delta x}}{1 + c \frac{\Delta t}{\Delta x}} f_b^{n-1} + \frac{2 c \frac{\Delta t}{\Delta x}}{1 + c \frac{\Delta t}{\Delta x}} f_{b-1}^n$$
(68)

Nach der Phasengeschwindigkeit c aufgelöst, ergibt sich

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_b^{n+1} - f_b^{n-1}}{f_b^{n+1} - 2f_{b-1}^n + f_b^{n-1}}$$
(69)

Diese Formel ist so natürlich nicht anwendbar, da die zu berechnende Größe f_b^{n+1} noch darin vorkommt. Die Phasengeschwindigkeit muß also entweder mit den Werten des vorhergehenden Zeitpunktes oder einen Gitterpunkt weiter innen berechnet werden. Auch eine Kombination aus räumlich wie zeitlich zurückliegenden Werten ist möglich.

Zeitlich zurück:

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_b^n - f_b^{n-2}}{f_b^n - 2 f_{b-1}^{n-1} + f_b^n}$$
(70)

Räumlich weiter innen:

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^{n+1} - f_{b-1}^{n-1}}{f_{b-1}^{n+1} - 2f_{b-2}^n + f_{b-1}^{n-1}}$$
(71)

Zeitlich und räumlich zurück:

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^n - f_{b-1}^{n-2}}{f_{b-1}^n - 2f_{b-2}^{n-1} + f_{b-1}^{n-2}}$$
(72)

3.1.3 Dämpfung

Im Gegensatz zu den bisher betrachteten Randbedingungen, die nur den Funktionswert am Randpunkt selbst beeinflußt haben, ist auch die Anwendung einer Dämpfungsschicht mit endlicher Breite in einer Umgebung des Randes des Modellgebietes denkbar [Anthes et al. (1989), Davies (1983), Kurihara et al. (1989), Staniforth (1997)]. Dabei wird das im Inneren angewandte prognostische Modell im Randbereich um einen weiteren, der Dämpfung dienenden Term erweitert. Bei Newtonscher Dämpfung führt diese Vorgehensweise zu folgendem Schema:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \operatorname{fct}\left(t, x, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \ldots\right) + k \left(f_{\infty} - f\right)$$
(73)

Der Parameter f_{∞} bezeichnet den konstanten Wert der Variablen f im stationären Zustand für $t \to \infty$. Hier soll $f_{\infty} = 0$ gelten, damit zum Rand hin laufende, wellenartige Gebilde einer Dämpfung mit im Idealfall verschwindender Amplitude unterliegen. Bei reiner Newtonscher Dämpfung, d.h. Unterdrückung des prognostischen Teils der Gleichung, lautet die Lösung nämlich

$$f(t) = f_{\infty} + (f(0) - f_{\infty}) e^{-kt}$$
(74)

mit f(0) = f(t = 0). In der Differenzenschreibweise kann die Gleichung mit einer Zwischenschrittmethode gelöst werden:

$$\frac{\tilde{f}_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} = \operatorname{fct}\left(t, x, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \ldots\right)$$
(75)

$$\frac{f_i^{n+1} - \tilde{f}_i^{n+1}}{\Delta t} = -k \,\tilde{f}_i^{n+1} \tag{76}$$

Nach f_i^{n+1} aufgelöst:

$$f_i^{n+1} = \tilde{f}_i^{n+1} - k\,\Delta t\,\tilde{f}_i^{n+1} = (1 - k\,\Delta t)\,\tilde{f}_i^{n+1} \tag{77}$$

Der Zwischenschritt mit der Newtonschen Dämpfung ist dann stabil, wenn die Funktionswerte f_i^{n+1} dem Betrage nach abnehmen, wenn also $\left|f_i^{n+1}/\tilde{f}_i^{n+1}\right| =$ $|1 - k\Delta t| \leq 1$ und damit $0 \leq k \leq 1$ gilt. Für den Dämpfungsparameter folgt dann $k \leq 1/\Delta t$. Es sind also wiederum zwei Extremfälle vorstellbar. Bei k = 0erfolgt überhaupt keine Dämpfung und damit auch keine Beeinflussung des prognostischen Modells. Dieses verhält sich demnach entsprechend, wie wenn der Funktionswert am Randpunkt konstant gehalten wird, was zu vollständiger Reflexion am Rand des Gebietes führt. Wird dagegen $k = 1/\Delta t$ gewählt, so ist die Wirkung der Dämpfung im Randbereich so stark, daß die Funktionswerte bereits innerhalb eines einzigen Zeitschrittes verschwinden. Auch in diesem Fall werden zum Rand hin laufende Wellen also komplett ins Innere des Gebietes zurückreflektiert. Allerdings erfolgt die Reflexion nun nicht mehr am Rand selbst, sondern um die Breite des Ubergangsbereiches, in dem zusätzlich die Dämpfung zur Anwendung gelangt, nach innen verschoben, d.h. an der Grenzfläche zwischen dem ungestörten Modellinneren und der Dämpfungsschicht. Beide Extremfälle ziehen folglich eine ins Innere zurückkehrende Welle mit unverminderter Amplitude nach sich und führen damit zu keinerlei Dämpfung. Um eine optimale Dämpfung der aus dem Inneren des Gebietes kommenden Wellen zu erreichen, muß also ein geeigneter Zwischenwert im erlaubten Wertebereich $0 \le k \le 1/\Delta t$ gefunden werden.

Anstelle der Newtonschen Dämpfung kann auch eine viskose bzw. diffusive Dämpfung Verwendung finden:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \operatorname{fct}\left(t, x, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \ldots\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\nu(x)\frac{\partial f}{\partial x}\right)$$
(78)

Wird in erster Näherung $\nu(x) \equiv \nu = \text{const.}$ gesetzt, dann vereinfacht sich dies zu

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \operatorname{fct}\left(t, x, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \ldots\right) + \nu \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$
(79)

Der Term $\partial^2 f/\partial x^2$ beschreibt im wesentlichen die Krümmung des Graphen der Funktion f. In der Umgebung eines Maximums ist die Funktion f rechtsgekrümmt, d.h. es gilt dort $\partial^2 f/\partial x^2 < 0$. Entsprechend gilt in der Umgebung eines Minimums von f die Ungleichung $\partial^2 f/\partial x^2 > 0$. Bei einer harmonischen Welle mit $f(x,t) = \hat{f} \exp[i k (x - ct)]$ ergibt sich der dämpfende Term zu

$$\nu \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = -\nu \, k^2 \, \hat{f} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,(x-c\,t)} = -\nu \, k^2 \, f \tag{80}$$

Dieser spezielle Fall läßt sich also auf die bereits behandelte Newtonsche Dämpfung zurückführen.

Die harmonische Welle $f(x) = \hat{f} \exp(i k x)$ führt zu folgender zeitabhängiger Lösung der reinen Diffusionsgleichung:

$$f(x,t) = \hat{f} e^{i k x} e^{-\nu k^2 t}$$
(81)

Die viskose Dämpfung führt dazu, daß diese Lösung für $t \to \infty$ verschwindet. Genau wie bei der bereits behandelten Newtonschen Dämpfung, gibt es auch hier zwei Extremfälle, bei denen totale Reflexion auftritt. Bei $\nu = 0$ findet überhaupt keine Dämpfung statt, und die Reflexion erfolgt direkt an der Grenze des Modellgebietes, wohingegen bei $\nu \to \infty$ innerhalb der Dämpfungsschicht die prognostischen Variablen stets Null sind und die zum Rand hin laufenden Wellen bereits an der Grenzfläche zwischen dem inneren, ungestörten Bereich des Simulationsgebietes und der von der Dämpfung beeinflußten Schicht zurückgespiegelt werden.

3.1.4 Konstanter Dämpfungskoeffizient

In allgemeiner Form lautet die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu(x) \frac{\partial f}{\partial x} \right) \tag{82}$$

Der spezielle Fall $\nu(x) \equiv \nu = \text{const.}$ führt zu der vereinfachten Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \nu \, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{83}$$

Die zeitliche Veränderung des Graphen der Funktion f hängt also von der zweiten Ableitung nach der Ortskoordinate x und damit im wesentlichen von der Krümmung der Kurve ab. Habe die auf die Berandung zulaufende Welle an der ansteigenden Flanke in erster Näherung die Form $f(x) = (-x)^n$. Für die Zeittendenz ergibt sich dann

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \nu n \left(n - 1 \right) (-x)^{n-2} \tag{84}$$

Dieser Term ist positiv für x < 0 und $n \ge 2$. Der Anfangsimpuls der auf die Grenzfläche zulaufenden Welle erfährt demnach eine Verstärkung. Diese Aussage gilt entsprechend für den abfallenden Teil eines Wellenpaketes, wenn also die Auslenkung des Modellparameters hinter der Welle wieder auf Null zurückgeht. Im mittleren Teil einer Welle erfolgt hingegen ein der Erwartung entsprechendes "korrektes" Verhalten, indem nämlich dieser Bereich der Auslenkung tatsächlich in Richtung zur Koordinatenachse hin gedämpft wird: In den Extrempunkten des Wellenpaketes lautet die Funktion f bei ausschließlicher Betrachtung der niedrigsten Potenzen $f(x) = 1 - x^2$, wenn es sich bei dem Extremum um ein Maximum der Funktion f handelt, respektive $f(x) = x^2 - 1$ bei einem Minimum von f. Da die zweite Ableitung nach der Ortskoordinate in beiden Fällen einen konstanten Wert ± 2 ergibt, dessen Vorzeichen der Auslenkung der Funktion am Extrempunkt gerade entgegen gerichtet ist, gilt entsprechendes für die zeitliche Veränderung dieser Auslenkung; deren Betrag vermindert sich also in jedem Fall mit fortschreitender Zeit.

3.1.5 Variabler Dämpfungskoeffizient

Der Dämpfungskoeffizient $\nu(x)$, der im allgemeinen Fall vom Ort abhängen kann, werde nun als zum Rand hin linear ansteigend gemäß $\nu(x) = \nu_0 (x - x_0)$ gewählt. Eine Dämpfung soll dabei nur im Randbereich $x_0 \leq x \leq x_b$ erfolgen. Weiter innen für $x \leq x_0$ soll $\nu(x) \equiv 0$ gelten. Die Diffusionsgleichung lautet nun

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\nu_0 \left(x - x_0 \right) \frac{\partial f}{\partial x} \right] \tag{85}$$

Für die ansteigende Flanke des Wellenpaketes gelte in erster Näherung wieder $f(x) = (-x)^n$. Dann folgt für die Zeittendenz der Funktion f

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\nu_0 \left(x - x_0 \right) \left(-n \right) (-x)^{n-1} \right]$$

$$= \nu_0 n \frac{\partial}{\partial x} \left[(-x)^n + x_0 (-x)^{n-1} \right]$$

$$= \nu_0 n \left[-n (-x)^{n-1} - x_0 (n-1) (-x)^{n-2} \right]$$

$$= \nu_0 n (-x)^{n-2} \left[n (x - x_0) + x_0 \right]$$

$$= h \left[n (x - x_0) + x_0 \right] \begin{cases} < 0 & x < x_0 \left(1 - \frac{1}{n} \right) \\ > 0 & x > x_0 \left(1 - \frac{1}{n} \right) \end{cases}$$

(86)

In dem stets positiven Koeffizienten $h := \nu_0 n (-x)^{n-2} > 0$ wurden dabei die Vorfaktoren zusammengefaßt. Für n > 1 stellt sich derselbe Effekt wie bei konstantem Dämpfungskoeffizienten ein. Im Randbereich $x_0 (1 - 1/n) < x < 0$ wird die ansteigende Flanke der eintreffenden Wellenfront verstärkt, wohingegen nur im mittleren Bereich des Wellengebildes mit $x_0 < x < x_0 (1 - 1/n)$ tatsächlich eine Dämpfung stattfindet. Die dämpfende Wirkung verbessert sich allerdings für n = 1: Trat bei n = 1 und konstantem ν keinerlei dämpfender Effekt auf, so erfolgt bei linearem Verlauf von $\nu(x)$ nun auch Dämpfung bei n = 1, also bei einer in erster Näherung linear ansteigenden Wellenflanke.

Dieses Ergebnis läßt sich auch bereits aus der reinen Diffusionsgleichung ableiten. Diese lautet nämlich nach Durchführung der äußeren Differentiation

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu(x) \frac{\partial f}{\partial x} \right) = \nu \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial \nu}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial x}$$
(87)

Wird in erster Näherung nur der Term $\partial \nu / \partial x \partial f / \partial x$ betrachtet,⁸ dann zeigt sich, daß an den Flanken der Gebilde, nämlich dort, wo eine Störung den zuvor bestehenden stationären Grundzustand allmählich überlagert, eine Vergrößerung der Funktionswerte von der Koordinatenachse weg erfolgt.

Von der Verwendung *diffusiver Dämpfung* ist wegen der Schwierigkeiten mit den seitlichen Flanken der am Rand eintreffenden Wellengebilde demnach eher abzuraten.

Derartige Unzulänglichkeiten lassen sich dadurch vermeiden, daß der Newtonschen Dämpfung der Vorzug gegeben wird. Im allgemeinen Fall lautet deren Dämpfungsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -k(x) f \tag{88}$$

Für räumlich konstanten Dämpfungskoeffizienten $k(x) \equiv k = \text{const. ergibt sich}$ die vereinfachte Differentialgleichung $\partial f / \partial t = -k f$, deren Lösung im Falle eines

⁸Dazu muß entweder ν vernachlässigbar klein oder aber die Krümmung der Kurve dergestalt sein, daß Verstärkung anstelle von Dämpfung erfolgt und somit der Term $\nu \partial^2 f / \partial x^2$ zur Abschwächung der Welle überhaupt nichts beiträgt und vom anderen Term entsprechend überkompensiert werden muß.

ruhenden, sich nicht fortbewegenden Mediums von der Form $f(t) = f_0 \exp(-kt)$ ist. Wird eine konstante Fortbewegungsgeschwindigkeit der Wellen von c = dx/dtangenommen, so läßt sich die Zeitabhängigkeit des Funktionsverlaufs in eine Abhängigkeit von der Ortskoordinate gemäß $f(x) = f_0 \exp(-k/cx)$ umschreiben. Es erfolgt also eine gleichmäßige Dämpfung sämtlicher Teile des Wellenpaketes.

Bei konstantem k im Dämpfungsbereich, also einem sprunghaften Anstieg des Dämpfungskoeffizienten, ergibt sich an der Grenze zwischen dem Modellinneren und der zum Rand hin liegenden Dämpfungsschicht ein Knick, der unerwünschte Störungen der Modellsimulation hervorrufen kann, die sich in den inneren Bereich ausbreiten können. Dieses Verhalten ist einsichtig bei sehr starkem, konstantem Dämpfungskoeffizienten. Das Modell verhält sich dann so, wie wenn überhaupt keine Dämpfungsschicht vorhanden wäre, denn die zum Rand hin laufenden Wellen werden bereits an der Grenzfläche zur Dämpfungsschicht größtenteils reflektiert. Der Eintritt in die Dämpfungsschicht sollte also einigermaßen "glatt" erfolgen. Bei einer Dämpfungsschicht, die schmäler ist als die halbe Länge des Wellenpaketes, erfolgt eine Überlagerung der in Phase reflektierten, bis zur Berandung vorstoßenden und damit gedämpften Welle mit der bereits an der Grenze zwischen ungestörtem Innenbereich und der Dämpfungsschicht unter Phasenumkehr reflektierten Welle. Diese Überlagerung kann in Abhängigkeit von der Wellenlänge zu einer zusätzlichen Verstärkung oder Abschwächung der reflektierten Welle führen.

3.2 Verfahren der Nestung von Modellgebieten

Es kommen ähnliche Methoden wie bei der Behandlung offener Ränder in Betracht.

3.2.1 Anpassung der Funktionswerte

Der einfachste Fall ist eine ständige Anpassung des Randwertes des inneren Gebietes an den Wert des äußeren Gebietes an derselben Stelle. Dann gilt

$$f_b^{n+1} = \tilde{f}_b^{n+1} \tag{89}$$

Dabei sollen die Werte des größeren Gebietes durch \tilde{f} dargestellt werden. Der Effekt dieses wohl einfachsten Falles einer Nestung besteht darin, daß zwar ein von außen kommendes Wellenpaket ungehindert durchgelassen wird. Für ein von innen kommendes Gebilde ist diese Nestungsbedingung allerdings identisch mit der Randbedingung $f_b^{n+1} \equiv 0$, die zu vollständiger Reflexion unter Umkehrung der Phase führt. Die alleinige Anpassung am Randpunkt selbst reicht demnach noch nicht aus. Deshalb wird nun der allgemeinere Fall betrachtet, bei dem die Anpassung des inneren Modells an das äußere Gebiet innerhalb einer Randschicht mit

endlicher Breite stattfindet. Im Prinzip kann diese Schicht beliebig breit gewählt werden. Allerdings sollte der überwiegende Teil des inneren Gebietes nicht zu dieser Randschicht gehören, damit die Wahl zweier Gebiete mit unterschiedlicher räumlicher Auflösung der Gitterpunkte überhaupt einen Sinn macht. Bei einer horizontalen Dimensionierung des Modells von in der Regel nicht mehr als 100 Gitterpunkten sollte die Anpassungsschicht maximal etwa zehn Gitterpunkte weit ins Innere des Gebietes hineinreichen. Die prognostische Gleichung der Funktion f erfährt durch die Newtonsche Anpassung folgende Ergänzung:

$$\frac{\partial f}{\partial t} := \frac{\partial f}{\partial t} + k \left(\tilde{f} - f \right) \tag{90}$$

Der Koeffizient k hängt dabei im allgemeinen vom Abstand zum Rand ab. In der Differenzenschreibweise lautet diese Gleichung

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} := \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + k \left(\tilde{f}_i^{n+1} - f_i^{n+1} \right)$$
(91)

$$f_i^{n+1} - f_i^n := f_i^{n+1} - f_i^n + k \,\Delta t \,\left(\tilde{f}_i^{n+1} - f_i^{n+1}\right) \tag{92}$$

$$\begin{aligned}
f_i^{n+1} &:= f_i^{n+1} + k \,\Delta t \, \left(\tilde{f}_i^{n+1} - f_i^{n+1} \right) \\
&= (1 - k \,\Delta t) \, f_i^{n+1} + k \,\Delta t \, \tilde{f}_i^{n+1}
\end{aligned} \tag{93}$$

Es handelt sich bei dieser Bedingung der Anpassung an das äußere Gebiet also um eine Konvexkombination der Funktionswerte in Abhängigkeit des Wichtungsfaktors $k \Delta t$, der nur innerhalb eines Anpassungsbereiches um den Rand des inneren Gebietes von Null verschiedene (und räumlich variable) Werte annimmt. Der Koeffizient k soll von k = 0 am Beginn der Anpassungszone zum Rand hin streng monoton anwachsen und dort seinen maximalen Wert von k = 1 erhalten. In der Literatur werden zum Funktionsverlauf des Anpassungskoeffizienten k verschiedene, größtenteils empirisch ermittelte, vereinzelt aber auch analytisch gewonnene Funktionen vorgeschlagen. Diese spezielle Wahl von k hat keinerlei Einfluß auf von außen kommende Wellen, die vielmehr ungehindert durchgelassen werden. Dies ist leicht einsichtig, wenn man bedenkt, daß die Linearkombination zur Bestimmung des Mischwertes aus innerem und äußerem Modell eine Konvexkombination mit der Koeffizientensumme $(1 - k\Delta t) + k\Delta t = 1$ darstellt. Bei identischem prognostischen Verhalten in beiden Gebieten, das zumindest hinsichtlich der langwelligeren, im gröberen Gitter auflösbaren Strömungsgebilde vorausgesetzt werden darf, werden stets zwei in hinreichender Näherung gleiche Werte in einer bestimmten Gewichtung kombiniert, die wegen der Identität der zu überlagernden Funktionswerte völlig ohne Belang ist. Der Antrieb durch das äußere

Modell ist bei dieser Art der Nestung der Gebiete also in jedem Fall sichergestellt. Wie die Koeffizienten k nun speziell zu wählen sind, hängt ausschließlich von den gewünschten Dämpfungseigenschaften gegenüber von innen kommenden, auf den Randbereich zulaufenden Wellen ab.

3.2.2 Anpassung der Zeittendenzen

Als Erweiterung der gewichteten Mittelung der Funktionswerte innerhalb der Randzone bietet es sich an, dieselbe Methode mit den zeitlichen Tendenzen dieser Werte durchzuführen [Perkey und Kreitzberg (1976)]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} := \alpha(x) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + [1 - \alpha(x)] \frac{\partial f}{\partial t}$$
(94)

Dabei gilt weiterhin $0 \le \alpha(x) \le 1$. Durch partielle Differentiation nach der Zeit folgt diese Darstellung wegen $\alpha(x) \ne \text{fct}(t)$ kausal aus der ihr zugrundeliegenden Form $f := \alpha(x) \tilde{f} + [1 - \alpha(x)] f$. Deshalb sind auch sämtliche in diesem Zusammenhang gewonnenen Ergebnisse ohne weiteres auf den Fall der Tendenzanpassung übertragbar. Der Umkehrschluß gilt jedoch nicht, wie anhand der diskretisierten Zuweisungsgleichung gezeigt werden kann:

$$\frac{f_i^{t+1} - f_i^t}{\Delta t} := \alpha \frac{\tilde{f}_i^{t+1} - \tilde{f}_i^t}{\Delta t} + (1 - \alpha) \frac{f_i^{t+1} - f_i^t}{\Delta t}$$
(95)

$$f_i^{t+1} := \alpha \, \tilde{f}_i^{t+1} + (1-\alpha) \, f_i^{t+1} + [f_i^t - \alpha \, \tilde{f}_i^t - (1-\alpha) \, f_i^t] \tag{96}$$

Der Term [...] in eckigen Klammern entspricht gerade der diskretisierten Form der Anpassung der *Funktionswerte* f selbst (eigentlich: $f_i^t := \alpha \tilde{f}_i^t + (1 - \alpha) f_i^t$) und wäre dort Null. Es besteht aber kein Grund, warum dieser Term hier im Zusammenhang mit der Anpassung der *Tendenzen* $\partial f/\partial t$ verschwinden soll.

Der Antrieb durch von außen kommende Wellen stellt wie bei der einfachen Anpassungsschicht in der Regel kein Problem dar. Näher untersucht werden müssen hingegen die Dämpfungseigenschaften gegenüber von innen auf die Grenzfläche zulaufenden Wellen, die an zu starker Reflexion gehindert werden sollen. Stellvertretend für komplexere partielle Differentialgleichungen wird wieder die (in einer hinreichend kleinen Umgebung stets in angemessener Näherung gültige) Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ betrachtet. Unter Vernachlässigung jedweder äußerer Einflüsse ($\tilde{f} \equiv 0$, damit auch $\partial \tilde{f}/\partial t \equiv 0$) folgt:

$$\frac{\partial f}{\partial t} := (1 - \alpha) \frac{\partial f}{\partial t} = -(1 - \alpha) c \frac{\partial f}{\partial x} = -c^* \frac{\partial f}{\partial x}$$
(97)

Die neue Advektionsgeschwindigkeit $c^* := (1 - \alpha) c$ liegt dann im Bereich $0 \leq c^* \leq c$, ist also gegenüber der ursprünglichen verringert, so daß in die Dämpfungsschicht eintretende Wellen abgebremst werden. Der Koeffizient α ist zur Grenzfläche hin normalerweise monoton steigend. Für $\alpha \longrightarrow 1$ ergibt sich $c^* \longrightarrow 0$, was sich ebenfalls in der Wellenlänge $\lambda = c^* T \longrightarrow 0$ niederschlägt; die Dämpfungsschicht fördert also die Verkürzung der Wellenlängen und damit eine Verlagerung des Schwerpunktes der Verteilung zu den kürzeren Wellen hin. Diese durch die Transformierung breiterer Gebilde entstandenen kurzen Wellen werden erheblich verstärkt, da mit $c^* \longrightarrow 0$ bei gleichzeitig nicht-verschwindender Tendenz $\partial f / \partial t \neq 0$ daraus wegen $|\partial f / \partial x| \longrightarrow \infty$ auf kleinstem Raum starke Gradienten erwachsen und der Funktionsverlauf dementsprechend steiler wird. Trotz der durchaus vorhandenen Eigenschaft, unerwünschte Reflexionen zu vermeiden oder sie zumindest teilweise zu minimieren, ist eine zusätzliche Glättung der auf diese Weise erhaltenen Funktionswerte dennoch unabdinglich.

3.2.3 Die Strahlungsbedingung am genesteten Rand

Zunächst einmal muß unterschieden werden zwischen Wellen, die von außen, und solchen, die von innen auf die Verbindungsfläche zusteuern. Um die Propagationsrichtung dieser Wellen korrekt zu erfassen, wird die Phasengeschwindigkeit $c = -\partial f / \partial t (\partial f / \partial x)^{-1}$ im Randbereich unabhängig voneinander in beiden Gebieten berechnet. Im folgenden sollen sich sämtliche Größen mit Tilde (z.B. \tilde{c}) auf Werte des alles umfassenden größeren Gebietes mit der schlechteren räumlichen Auflösung der Maschenweite des Gitters beziehen, wohingegen die durch gewöhnliche Buchstaben dargestellten Variablen die damit korrespondierenden Werte des zentralen, genesteten Gebietes umfassen. Beispielsweise lassen sich auf diese Weise die folgenden Phasengeschwindigkeiten berechnen, die von der Differenzenform der Advektionsgleichung herrühren, wobei aber die Differenzen vom Rand aus gesehen einen Gitterpunkt weiter innen gebildet werden:⁹

$$c = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{f_{b-1}^{n+1} - f_{b-1}^n}{f_{b-1}^n - f_{b-2}^n}$$
(98)

$$\tilde{c} = -\frac{\widetilde{\Delta x}}{\widetilde{\Delta t}} \frac{\tilde{f}_b^{n+1} - \tilde{f}_b^n}{\tilde{f}_b^n - \tilde{f}_{b-1}^n} = -\frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\tilde{f}_b^{n+1} - \tilde{f}_b^n}{\frac{1}{2} \left(\tilde{f}_b^n - \tilde{f}_{b-1}^n\right)}$$
(99)

Die Phasengeschwindigkeit kann auf beiden Seiten des Randes berechnet werden, also in den beiden Gebieten unabhängig voneinander. Die Phasengeschwindigkeit c des inneren Modells kann nach einer der bei der entsprechenden Behandlung

⁹Es wäre auch möglich, die Phasengeschwindigkeit am Randpunkt selbst, aber zu dem jeweils vorhergehenden Zeitpunkt zu berechnen. Dann müßten aber auch die jeweiligen Werte dieses früheren Zeitschrittes im Speicher gehalten werden, was zusätzlichen Speicherplatz erfordert.

offener Ränder dargestellten Methoden berechnet werden. Hinsichtlich der Phasengeschwindigkeit \tilde{c} des äußeren Modells an der Grenzfläche lassen sich nunmehr auch zentrierte räumliche Differenzen verwenden, weil der Rand des inneren Gebietes für das größere, äußere Gebiet schließlich keine Diskontinuität darstellt.

Sind die so berechneten Phasengeschwindigkeiten c und \tilde{c} bekannt, dann erlauben sie folgende Fallunterscheidung: Falls $\tilde{c} \geq 0$, also keine von außen kommende Welle zu erwarten ist, oder außen $\tilde{f} \equiv 0$ gilt und damit der Differenzenquotient in (99) genau genommen überhaupt nicht definiert ist, so soll sich die Grenzfläche wie ein offener Rand gegenüber von innen kommenden Wellenpaketen verhalten, was z.B. durch die folgende Spezifizierung des Randes zum Ausdruck kommt (gewöhnliche Ausstrahlungsbedingung):

$$f_b^{n+1} := c f_{b-1}^n + (1-c) f_b^n \tag{100}$$

Falls jedoch $\tilde{c} < 0$ ist, also ein äußerer Antrieb erfolgen soll, dann wird dies am ehesten dadurch erreicht, daß am Randpunkt selbst eine feste Kopplung an das äußere Modell z.B. gemäß $f_b^{n+1} := \tilde{f}_b^{n+1}$ eingerichtet wird. Diese beiden Fälle lassen sich nun mithilfe einer Linearkombination (in diesem Fall sogar über eine Konvexkombination) überlagern:

$$f_b^{n+1} = (1-k) \left(c f_{b-1}^n + (1-c) f_b^n \right) + k \tilde{f}_b^{n+1}$$
(101)

Der Kombinationsfaktor k hängt dabei nur von \tilde{c} ab: Für $\tilde{c} < 0$ gilt $k \equiv 1$, falls $\tilde{c} \geq 0$, dann ist $k \equiv 0$ zu wählen. Dies läßt sich auch in einem geschlossenen Zusammenhang darstellen (wobei allerdings der Spezialfall $\tilde{c} = 0$ undefiniert ist):

$$k := \frac{1 - \tilde{c}/|\tilde{c}|}{2} = \begin{cases} 0 & \tilde{c} > 0\\ 1 & \tilde{c} < 0 \end{cases}$$
(102)

Dieses Verfahren arbeitet zufriedenstellend, solange *entweder* Störungen von außen *oder* von innen auf die Verbindungsfläche zulaufen. Bei gleichzeitigem Eintreffen von Wellen vergleichbarer Intensität aus beiden Richtungen kann es zu einer – je nach Phasenlage – mehr oder weniger vollständigen Kompensation kommen, obwohl die Wellen – freie allseitige Propagation vorausgesetzt – sich unter Beibehaltung ihres bisherigen Bewegungszustandes unbeschadet gegenseitig durchdringen müßten. Auf den hier behandelten Fall eines genesteten Systems übertragen, wobei Propagation durch die Grenzfläche nur von außen nach innen erlaubt sei ("Einweg-Nestung"), sollte im Inneren des zentralen Gebietes in der Folge des Grenzdurchganges nur noch die zuvor von außen eingedrungene Welle zu registrieren sein. Durch die eben erwähnte Kompensierungstendenz kann diese Welle aber fälschlicherweise in ihrer Intensität unter Umständen (dies hängt von der genauen Phasenlage ab) deutlich von ihrem Ausgangszustand abweichen.
Ein derartiges Manko ist durchaus kein Charakteristikum der hier beschriebenen Strahlungsbedingung, sondern ist vielmehr sämtlichen "punktweisen" Nestungsbedingungen zu eigen, bei denen nur der Randpunkt selbst in geeigneter Weise modifiziert wird. Kommt demgegenüber eine sich über mehrere Gitterweiten erstreckende Anpassungsschicht zur Verwendung, tritt dieses Problem in den Hintergrund angesichts der Tatsache, daß der Übergang vom äußeren in das innere Gebiet nunmehr allmählich erfolgt (innerhalb einer Schicht endlicher Breite), wobei die beiden Modelle in diesem Raumbereich nebeneinander ablaufen, so daß der physikalischen Forderung der ungehinderten gegenseitigen Durchdringung der Wellen in verstärktem Maße Rechnung getragen wird.

4 Das Verhalten von Wellen am offenen und genesteten Rand

Nachdem jetzt sämtliche benötigten Begriffe und Methoden bekannt sind, erfolgt in diesem Kapitel nun eine eingehende analytische Behandlung des Verhaltens von Wellen am offenen und genesteten Rand.

4.1 Reflexion am festen Rand

Eine teilweise Reflexion an der Randfläche, die eine zurückkommende Welle verursacht, kann nur dann auftreten, wenn das Modell als Ganzes überhaupt Wellenlösungen zuläßt. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit läßt sich deshalb eine von innen auf den Rand zulaufende Welle in der Form $f(x - x_0 - ct)$ darstellen, wobei der Verlauf der Funktion f in dieser kontinuierlichen Betrachtung – ohne Berücksichtigung des zur Diskretisierung führenden Gitternetzes – zunächst beliebig ist; es wird lediglich angenommen, daß es sich dabei um eine stetige Funktion handelt. Die Konstante $x_0 = x(t = 0)$ soll den Ursprungsort eines Wellenpaketes bzw. dessen Referenzpunktes beschreiben. Eine etwaige zurückreflektierte Welle hat zwar eine dem Betrag nach gleiche Phasengeschwindigkeit c; da die Welle aber in die entgegengesetzte Richtung wie die einfallende Welle läuft, ist diese Phasengeschwindigkeit negativ. Hierfür steht die Darstellung $g(x-x_b+c[t-(x_b-x_0)/c])$. Die Verschiebung in der Ortskoordinate $(x-x_b)$ anstelle von x) ergibt sich aus der Tatsache, daß die reflektierte Welle ihren Ursprung im Randpunkt mit der Koordinate x_b hat. Diese Welle entsteht erst zu dem Zeitpunkt $(x_b - x_0)/c$, an welchem das einfallende Wellenpaket (oder vielmehr dessen willkürlich gewählter Referenzpunkt – z.B. der "Mittelpunkt") gerade den Rand erreicht. Entsprechend ist deshalb auch die Zeitkoordinate verschoben $(t - (x_b - x_0)/c$ anstelle von t).

Im folgenden werden nun die bei Anwendung einiger grundlegenden Randbedingungen auftretenden reflektierten Wellen ermittelt. Zunächst wird der Randwert als unveränderlich angenommen (fester Rand) und mit dem konstanten Werten Null belegt. Die Summe aus der auf den Rand zulaufenden und der ins Innere zurückreflektierten Welle muß deshalb am Randpunkt x_b selbst stets ebenfalls Null ergeben:

$$f(x_b - x_0 - ct) + g\left(x_b - x_b + c\left[t - \frac{x_b - x_0}{c}\right]\right) = 0$$
(103)

$$g(ct - x_b + x_0) = -f(x_b - x_0 - ct)$$
(104)

Führt man nun die seit dem Erreichen des Randes durch die originäre Welle verstrichene Zeit $t' = t - (x_b - x_0)/c$ ein, so läßt sich die Beziehung zwischen der ursprünglichen und der reflektierten Welle wie folgt schreiben:

$$g(ct') = -f(-ct')$$
(105)

Das Produkt ct' =: x' stellt aber gerade die Distanz dar, die das reflektierte Wellenpaket, vom Randpunkt her kommend, bereits zurückgelegt hat.

$$g(x') = -f(-x')$$
(106)

Der Ort mit der Koordinate x' der Reflexfunktion g stellt für die Einfallsfunktion f den Zustand an genau derselben Stelle dar – mit negativem Vorzeichen in der Zeitkoordinaten, d.h. zu der entsprechenden Zeitdifferenz *vor* dem Auftreffen auf die Grenzfläche. Das Ergebnis g = -f bedeutet deshalb bei der Reflexion schlichtweg eine Spiegelung der einfallenden Welle an der Nullinie. Der Betrag der Amplitude bleibt dabei erhalten.

Dasselbe Ziel läßt sich auch auf einem anderen Weg erreichen: Ein (zeitlich) konstanter Randwert bringt die Ableitung nach der Zeit am Randpunkt zum Verschwinden. Folglich muß die Summe der zeitlichen Ableitungen der ursprünglichen und der reflektierten Welle am Randpunkt stets Null ergeben:

$$-c f'(x_b - x_0 - c t) + c g'\left(x_b - x_b + c \left[t - \frac{x_b - x_0}{c}\right]\right) = 0$$
(107)

$$c g'(c t') = c f'(-c t')$$
 (108)

$$g'(x') = f'(-x')$$
(109)

Daß die beiden Bedingungen g(x') = -f(-x') bzw. g'(x') = f'(-x') sich gegenseitig entsprechen, ist leicht zu sehen, wenn die erste Aussage nach x' differenziert wird. Man beachte die Analogie zur Spiegelung einer Funktion am Koordinatenursprung.

Nun soll eine analoge Betrachtung für einen offenen Rand durchgeführt werden. Hierzu wird anstelle des zuvor verwendeten konstanten, d.h. von Anfang an vorgegebenen Randwertes jetzt ein Einfluß des aktuellen Strömungsmusters im Randbereich zugelassen. Dies erfolgt im Rahmen einer (räumlichen) Extrapolation. Deren einfachste Form besteht darin, daß dem zu spezifizierenden Randwert der entsprechende Funktionswert am Nachbarpunkt zugeordnet wird. Diese auf die endlichen Differenzen im Koordinatengitter zugeschnittene Regel ist in der anderen, kontinuierlichen Betrachtungsweise gleichbedeutend mit einer stets waagerechten Tangente des Funktionsverlaufes am Randpunkt, was schlichtweg eine alternative Formulierung der Tatsache darstellt, daß sich der Randwert innerhalb einer (infinitesimalen oder endlich breiten) Umgebung nicht ändert.

Mit den obigen Formulierungen – $f(x - x_0 - ct)$ für die vom Inneren auf die Grenzfläche zulaufende Welle bzw. $g(x - x_b + c[t - (x_b - x_0)/c])$ für die nach innen zurückreflektierte Welle – ergibt sich nun die folgende Forderung an die ersten räumlichen Ableitungen der beiden Funktionen, daß nämlich deren Summe am Randpunkt selbst verschwinden soll:

$$f'(x_b - x_0 - ct) + g'\left(x_b - x_b + c\left[t - \frac{x_b - x_0}{c}\right]\right) = 0$$
(110)

$$g'(ct - x_b + x_0) = -f'(x_b - x_0 - ct)$$
(111)

$$g'(ct') = -f'(-ct')$$
(112)

$$g'(x') = -f'(-x') \tag{113}$$

Dieses Ergebnis ist – in ähnlicher Vorgehensweise wie beim festen Rand – gleichwertig mit g(x') = f(-x'), wie durch Ableiten dieser Beziehung nach x' offensichtlich wird. Man beachte wiederum die Analogie zur Spiegelung einer Funktion – diesmal allerdings an der Koordinatenachse.

Als Resultat ergibt sich bei der hier durchgeführten räumlichen Extrapolation, daß die reflektierte Welle mit der vollständigen Amplitude der zum Rand hin einfallenden Welle wieder ins Innere zurückgeworfen wird.

4.2 Reflexion an einem über die Ausstrahlungsbedingung spezifizierten Rand

Die Ausstrahlungsbedingung ist durch die Anwendung einer lokalen Advektionsgleichung der Form $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ in unmittelbarer Umgebung des Randes definiert. Die Advektionsgeschwindigkeit $c \leq 0$ soll dabei stets zur Randfläche hin gerichtet sein, um die Rückwirkung von durch die Randnähe hervorgerufenen Störungen auf das Gebietsinnere zu unterbinden.

Eine einfallende Welle $f(x,t) = \hat{f} \exp[i(kx - \omega t)]$ erzeugt im Randbereich eine (günstigstenfalls stark abgeschwächte) reflektierte Welle $g(x,t) = \hat{g} \exp[i(k'x - \omega't + \varphi)]$. Dabei stellen k und k' die Wellenzahlen der einfallenden bzw. reflektierten Welle dar, ω und ω' entsprechend deren Winkelgeschwindigkeiten, und φ

steht für eine eventuell bei der Reflexion auftretende Phasenverschiebung. Beide Wellen überlagern sich im gesamten Integrationsgebiet, so daß unter Anwendung der die Ausstrahlungsbedingung charakterisierenden lokalen Advektionsgleichung gilt [Pearson (1974)]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(f+g\right) + c\frac{\partial}{\partial x}\left(f+g\right) = 0 \tag{114}$$

$$-\mathrm{i}\,\omega\,\hat{f}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(k\,x-\omega\,t)} - \mathrm{i}\,\omega'\,\hat{g}\,\mathrm{e}^{k'\,x-\omega'\,t+\varphi)} + c\,\left(\mathrm{i}\,k\,\hat{f}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(k\,x-\omega\,t)} + \mathrm{i}\,k'\,\hat{g}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(k'\,x-\omega'\,t+\varphi)}\right) = 0\tag{115}$$

Da die reflektierte Welle durch eine Welle mit der Winkelgeschwindigkeit ω hervorgerufen wird, übernimmt sie deren Winkelgeschwindigkeit gemäß $\omega' = \omega$. Der Wellenvektor kehrt hingegen bei der Reflexion seine Richtung um, so daß lediglich der Betrag der Wellenzahl k invariant bleibt; es gilt also k' = -k. Eine etwaige Phasenverschiebung φ zwischen einfallender und reflektierter Welle kann in die Amplitude \hat{g} der zurückkehrenden Welle integriert werden und muß deshalb nicht weiter betrachtet werden. Die zwischen den Amplituden \hat{f} und \hat{g} der einfallenden bzw. reflektierten Welle bestehende Beziehung vereinfacht sich dann zu

$$-\omega \hat{f} e^{ikx} - \omega \hat{g} e^{-ikx} + c \left(k \hat{f} e^{ikx} - k \hat{g} e^{-ikx} \right) = 0$$
(116)

Sowohl der Real- als auch der Imaginärteil dieser Gleichung liefern schließlich denselben Ausdruck für das Verhältnis der Amplituden zueinander, durch das die Dämpfung der zurückgeworfenen Welle gegenüber der sie verursachenden gekennzeichnet ist:

$$\left|\frac{\hat{g}}{\hat{f}}\right| = \left|\frac{\omega - kc}{\omega + kc}\right| \tag{117}$$

Die Gültigkeit dieser Gleichung ist auf den kontinuierlichen Fall beschränkt und liefert dort mit $c = \omega/k$ das triviale Ergebnis $\hat{g}/\hat{f} = 0$; eine reflektierte Welle tritt im kontinuierlichen Raum also überhaupt nicht in Erscheinung. Dies ist auch nicht weiter verwunderlich, da die Ausstrahlungsbedingung ja gerade so eingerichtet wurde, daß keine Reflexion möglich ist.

Im Gitternetz des diskretisierten Raumes läßt sich die am Rand anzuwendende Advektionsgleichung hingegen aufgrund bei der Überführung der Differentialoperatoren in endliche Differenzen unweigerlich auftretenden Abschneidefehlern nicht mehr völlig korrekt darstellen, was sich natürlich auch in ihrem prognostischen Verhalten widerspiegelt. Dadurch erklärt sich unter anderem das numerisch bedingte Auftreten einer reflektierten Welle im Ausstrahlungsfall, obwohl eine solche nach den Grundvoraussetzungen eigentlich überhaupt nicht existieren dürfte und – wie eben gezeigt – im kontinuierlichen Raum tatsächlich auch nicht vorkommt.

Anhand der diskretisierten Form der Advektionsgleichung mit ihren endlichen Differenzen läßt sich das Auftreten von Wellenphänomenen nicht besonders anschaulich erklären. Darum geht man am besten wie in (11) vor und rückübersetzt die Differenzen wieder in Differentiale, wobei aber die zuvor in Kauf genommenen Diskretisierungsfehler beibehalten werden. Nach (11) gilt dann für die kontinuierliche Entsprechung der diskretisierten Advektionsgleichung mit einseitigen räumlichen Differenzen:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -c\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{c}{2}\frac{\partial f^2}{\partial x^2}\Delta x \tag{118}$$

Erfolgt wieder – den obigen Gesetzmäßigkeiten entsprechend – die Aufteilung in eine einfallende und eine reflektierte Welle, so ergibt sich nun in analoger Weise die folgende Beziehung zwischen den Amplituden \hat{f} und \hat{g} der ursprünglichen und der induzierten Welle:

$$i\omega \hat{f} - i\omega \hat{g} = -c (ik\hat{f} - ik\hat{g}) - \frac{c}{2} (-k^2\hat{f} - k^2\hat{g})\Delta x$$
 (119)

Daraus läßt sich wieder das Verhältnis der Amplituden \hat{g}/\hat{f} bilden, das bekanntlich die Dämpfung der vom Rand zurückkehrenden Welle beschreibt.

$$\frac{\hat{g}}{\hat{f}} = \frac{\mathrm{i}\left(\omega - c\,k\right) + \frac{c}{2}\,k^2\,\Delta x}{-\mathrm{i}\left(\omega + c\,k\right) - \frac{c}{2}\,k^2\,\Delta x} \tag{120}$$

$$\left|\frac{\hat{g}}{\hat{f}}\right|^{2} = \frac{(\omega - ck)^{2} + \left(\frac{c}{2}k^{2}\Delta x\right)^{2}}{(\omega + ck)^{2} + \left(\frac{c}{2}k^{2}\Delta x\right)^{2}}$$
(121)

Trotz $\omega = c k$ verschwindet das Amplitudenverhältnis nun nicht mehr (wie zuvor im kontinuierlichen Fall), sondern nimmt stets einen von Null verschiedenen Wert an:

$$\left|\frac{\hat{g}}{\hat{f}}\right|^{2} = \frac{\left(\frac{c}{2}k^{2}\Delta x\right)^{2}}{(2\,c\,k)^{2} + \left(\frac{c}{2}k^{2}\Delta x\right)^{2}} = \frac{(k\,\Delta x)^{2}}{16 + (k\,\Delta x)^{2}} \tag{122}$$

Dieses Verhältnis strebt nur dann gegen Null, wenn entweder Δx sehr klein ist (Übergang zum kontinuierlichen Raum) oder aber wegen $k = 2\pi/\lambda$ die Welle eine – auf die Schrittweite Δx bezogen – sehr große Wellenlänge λ aufweist und damit an den Gitterpunkten so genau aufgelöst wird, daß man von einer kontinuierlichen Funktion sprechen kann. Für $k \Delta x \gg 1$ folgt hingegen $|\hat{g}/\hat{f}| \approx 1$. Derartig schlecht im Punktegitter aufgelöste Wellen werden also trotz Ausstrahlungsbedingung vollständig vom Rand ins Innere zurückreflektiert. Im wesentlichen handelt es sich dabei um die sogenannten 2- Δ -Wellen mit $\lambda = 2 \Delta x$, also diejenigen Wellen mit der geringstmöglichen, durch die Gitterweite Δx vorgegebenen Wellenlänge. Für diese Art Wellen nimmt nämlich $k \Delta x = 2 \pi \Delta x / \lambda = 2 \pi \Delta x / (2 \Delta x) = \pi$ seinen geringsten Wert an. 2- Δ -Wellen können demnach von einer Ausstrahlungsrandbedingung unter Verwendung einer lokalen Advektionsgleichung nicht korrekt verarbeitet, d.h. nicht vollständig an der Randfläche absorbiert werden.

4.3 Dispersion der Advektionsgeschwindigkeit bei nichtsenkrechtem Einfall

Der Einfachheit halber wird in analytischen Betrachtungen im Zusammenhang mit Randbedingungen meistens lediglich der idealisierte Fall einer senkrecht auf die Randfläche auftreffenden Welle untersucht [u.a. bei Hedley und Yau (1988), Hedstrom (1979)]. Man nimmt dabei stillschweigend an, daß eine unter einem beliebigen Winkel einfallende Welle in einen senkrecht und einen parallel zur Grenzfläche verlaufenden Anteil zerlegt werden kann. Diese Annahme ist aber nur dann wirklich gerechtfertigt, wenn das zugrundeliegende System der Differentialgleichungen im Randbereich die Eigenschaft der Linearität besitzt und damit derartige Superpositionen von Einzellösungen selbst wiederum in den Gleichungssystemen enthalten sind. Als problematisch erweist sich diese Vereinfachung hingegen, wenn nichtlineare Differentialgleichungen beteiligt sind. Bei veränderlicher Advektionsgeschwindigkeit ist auch die Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ dieser Kategorie nichtlinearer Differentialgleichungen zuzuordnen. Weil die Ausstrahlungsrandbedingung aber im wesentlichen aus einer solchen, in unmittelbarer Umgebung der Randfläche lokal anzuwendenden Advektionsgleichung besteht, ist die Aufteilung in orthogonal zueinander verlaufende Wellenanteile in diesem Fall eigentlich nicht korrekt.

Im folgenden soll nun das tatsächliche Verhalten einer unter beliebigem Winkel einfallenden Welle $f(x, y, t) = \hat{f} \exp[i(kx+ly-\omega t)]$ mit Wellenzahlen k und l in zwei Dimensionen untersucht werden. In Ausbreitungsrichtung der Welle führt die Addition der Wellenvektoren zur alleinigen Wellenzahl $(k^2 + l^2)^{1/2}$. Diese ist mit der Frequenz ω über $\omega = c (k^2 + l^2)^{1/2}$ verbunden. Daraus resultiert zunächst eine Verringerung der Gruppengeschwindigkeit $c_{\rm gr} = \partial \omega / \partial k = k c (k^2 + l^2)^{-1/2} < c$. Bei der Ausstrahlungsbedingung ist es aber die Phasengeschwindigkeit $c_{\rm ph} = \omega/k$ selbst, welche für die Advektion der Wellen zum Rand hin sorgt und damit unerwünschte Reflexionen unterbindet. Die Phasengeschwindigkeit $c_{\rm ph}$ als Funktion der zusätzlich vorhandenen Wellenzahl l, die eine tangential zur Grenzfläche verlaufende Welle charakterisiert, erhält man durch Auflösen der Beziehung $\omega^2 = c^2 (k^2 + l^2)$ nach k [Durran et al. (1993)]:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{c^2 l^2}{\omega^2}} \tag{123}$$

$$c_{\rm ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{1 - \frac{c^2 l^2}{\omega^2}}} > c \tag{124}$$

Die Phasengeschwindigkeit $c_{\rm ph}$ erhöht sich also im Vergleich zur ursprünglichen Propagationsgeschwindigkeit c der Welle. Außerdem hängt die Phasengeschwindigkeit nun auch von der Frequenz ω ab; es tritt also eine Dispersion auf. Mit $(1 - c^2 l^2/\omega^2)^{1/2} \approx 1 - c^2 l^2/2 \omega^2$ folgt bei nur wenig von der Normalenrichtung abweichendem Einfall der Welle $\omega/k \approx c (1 - c^2 l^2/2 \omega^2)$. Dies führt schließlich zu der Dispersionsrelation $\omega^2 - c \omega k - c^2 l^2/2 = 0$. Mit den partiellen Ableitungen $\partial f/\partial t = -i \omega f$, $\partial f/\partial x = i k f$ und $\partial f/\partial y = i l f$ läßt sich diese Beziehung als Differentialgleichung darstellen:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + c \frac{\partial^2 f}{\partial t \, \partial x} - \frac{c^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0 \tag{125}$$

Gegenüber der ursprünglichen Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ kommt also ein zusätzlicher Term mit $\partial^2 f/\partial y^2$ hinzu, über welchen Variationen der Auslenkung f tangential zur Randfläche Berücksichtigung finden.

4.4 Auswirkungen der Dispersion auf die Ausstrahlungsbedingung

Die Ausstrahlungsrandbedingung besteht aus einer Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$, die in unmittelbarer Umgebung des Randes anzuwenden ist. Die dazu benötigte Phasengeschwindigkeit $c = -\partial f/\partial t (\partial f/\partial x)^{-1}$ wird mit derselben Formel berechnet, wobei nach erfolgter Diskretisation dazu entweder die Werte des vorangehenden Zeitschrittes oder aber die einen Gitterpunkt weiter innen liegenden (vom Rand aus gesehen) Verwendung finden. Diese Methode kann selbstverständlich nur dann funktionieren, wenn die Ausbreitungsgeschwindigkeit der auf den Rand zulaufenden Wellen sowohl räumlich als auch zeitlich keinen allzu raschen Veränderungen unterliegt, so daß zumindest im Bereich der Größenordnung einer Gitterweite Δx bzw. eines Zeitschrittes Δt die Propagationsgeschwindigkeit c als hinreichend konstant gelten kann. Das wird am ehesten von den längeren Wellen erfüllt, die (räumlich und zeitlich) im Gitterpunktraster gut aufgelöst werden.

Je nach Art der Ersetzung der infinitesimalen Differentiale durch endliche Differenzen bei der Diskretisierung der prognostischen Differentialgleichungen treten darüberhinaus zusätzliche, durch unvermeidbare Abschneidefehler hervorgerufene Abweichungen der numerisch ermittelten Phasengeschwindigkeit c' von der wahren Fortbewegungsgeschwindigkeit c auf. Bei einseitigen Differenzen beträgt der Abbruchfehler durch Ersetzen des Differentials $\partial f/\partial x$ mit der Näherung $[f(x + \Delta x) - f(x)]/\Delta x$ in der führenden Ordnung $\partial^2 f/\partial x^2 \Delta x/2$, die zentrierte Differenz $[f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)]/2 \Delta x$ ist mit einem in Δx quadratischen Abschneidefehler $\partial^3 f/\partial x^3 (\Delta x)^2/6$ für $\Delta x \longrightarrow 0$ genauer; entsprechendes gilt für die Differenzenformen der zeitlichen Ableitung $\partial f/\partial t$.

Es stellt sich also die Frage, welchen Fehler man begeht, wenn anstelle der augenblicklich herrschenden Phasengeschwindigkeit c in der Advektionsgleichung ein davon mehr oder weniger abweichender Wert c' = k c verwendet wird:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c' \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial t} + k c \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$
(126)

Die Welle hat mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit c die allgemeine Form $f_0(x - ct)$. Damit wird die Advektionsgleichung $\partial f_0/\partial t + c \partial f_0/\partial x = 0$ erfüllt. Da zu erwarten ist, daß – bedingt durch die Modifizierung der Advektionsgleichung – sich auch die Gestalt der Welle ändert, bietet es sich an, den neuen Funktionsverlauf $f := f_0 + f'$ als Summe aus dem ursprünglichen (f_0) und einem zusätzlich hinzukommenden Term f' zu schreiben. Wird dies in die Advektionsgleichung mit der veränderten Phasengeschwindigkeit eingesetzt, so folgt daraus

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\partial f'}{\partial t} + k c \left(\frac{\partial f_0}{\partial x} + \frac{\partial f'}{\partial x} \right) = 0$$
(127)

$$\frac{\partial f'}{\partial t} = -\frac{\partial f_0}{\partial t} - k c \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\partial f'}{\partial x} \right) = (k-1) \frac{\partial f_0}{\partial t} - k c \frac{\partial f'}{\partial x}$$
(128)

Eine Störwelle f' läuft demnach mit der neuen Advektionsgeschwindigkeit c' = k cauf den Rand zu $(\partial f'/\partial t \approx -k c \partial f'/\partial x)$. Hervorgerufen wird diese allerdings erst durch den mit der Originalwelle gekoppelten Term $(k-1) \partial f_0/\partial t$, der für k = 1und damit c' = c verschwindet, ansonsten übernimmt f' den (k-1)-fachen Anteil der Zeittendenz der ursprünglichen Welle $(\partial f'/\partial t \approx (k-1) \partial f_0/\partial t)$. Bei k > 1, d.h. Advektion mit zu großer Geschwindigkeit, wirkt die Störwelle verstärkend, wohingegen im Falle k < 1, also zu geringer Advektionsgeschwindigkeit, die Originalwelle abgeschwächt wird. Verstärkung und Abschwächung treten dabei wegen der Koppelung über die Zeittendenz in Form von Beschleunigung bzw. Verzögerung der zeitlichen Aufeinanderfolge der einzelnen Wellenteile hervor; die Interpretation bleibt aber dieselbe.

Bei der Ausstrahlungsrandbedingung wird die Advektionsgleichung mit der Phasengeschwindigkeit c', die aus den oben erwähnten Gründen von der tatsächlichen Propagationsgeschwindigkeit abweichen kann, genaugenommen nur am Randpunkt selbst angewandt. Eine mit der Geschwindigkeit c auf den Rand zulaufende Welle f(x - ct) gerät dann direkt an der Grenzfläche in den Einflußbereich der Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c' \partial f/\partial x = 0$ und wird im weiteren Verlauf mit dieser neuen Geschwindigkeit c' aus dem Simulationsgebiet hinausbewegt (daher auch die bildliche Umschreibung als "Ausstrahlung"). Es erfolgt also eine Aufteilung des Raumes in zwei Bereiche, in denen das prognostische Verhalten jeweils durch Advektionsgleichungen gegeben ist. Im Gebietsinneren herrscht die Transportgeschwindigkeit c vor, wohingegen man sich im gesamten äußeren Raum eine Advektion mit der konstanten, am Randpunkt induzierten Geschwindigkeit c'vorstellen darf. Auf jeden Fall gilt mit der örtlich beschränkten Advektionsgleichung am Randpunkt:

$$\frac{\partial f}{\partial t} := -c' \frac{\partial f}{\partial x} \tag{129}$$

$$f(x,t) := -c' \int \frac{\partial f}{\partial x} dt + \text{const.}$$
(130)

Weil die Welle selbst in der Form f(x-ct) dargestellt werden kann, sind Orts- und Zeitableitungen gemäß $\partial f/\partial t = -c \partial f/\partial x$ miteinander verknüpft, und Gleichung (130) lautet dann

$$f(x,t) := -c' \int -\frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} dt = \frac{c'}{c} f(x,t)$$
(131)

Die in (130) eigentlich auftretende Integrationskonstante bleibt dabei unberücksichtigt, was sich im nachhinein anhand des Ergebnisses auch physikalisch begründen läßt. Im Falle $c' \equiv c$ sollte nämlich am Randpunkt der Funktionsverlauf keinerlei Änderungen unterworfen sein, weil dann die Differentialgleichungen in Form der hier betrachteten Advektionsgleichungen keinen sprunghaften räumlichen Änderungen unterliegen, sondern vielmehr ein kontinuierlicher Übergang aus dem Integrationsgebiet hinaus besteht. Die Abweichung vom ursprünglichen Funktionsverlauf |1 - c'/c| f(x,t) wird demnach durch die Situation am Rand selbst hervorgerufen. Dieser zusätzlich auftretende Anteil stellt den Unterschied zwischen den Wellenfunktionen im Inneren des Gebietes und außerhalb davon dar. Weil er innen ursprünglich nicht vorhanden war und deshalb dort auch keine Entsprechung besitzt, trägt er in vollem Umfang zur teilweisen Reflexion der Welle, zurück in den zentralen Bereich, bei. Die Reflektivität einer sich mit der Geschwindigkeit c fortbewegenden Welle beträgt deshalb |1-c'/c| bei Anwendung einer Ausstrahlungsrandbedingung in Form einer lokalen Advektionsgleichung mit der geschätzten, hier aber als nicht exakt angenommenen Advektionsgeschwindigkeit c'. Für $c' \equiv c$ ergibt sich selbstverständlich wieder die Reflektivität Null, durch welche die Ausstrahlungsbedingung im Idealfall charakterisiert wird.

4.5 Reflexion an einer Dämpfungsschicht

Im Gegensatz zu "punktartigen" Randbedingungen (wie z.B. Extrapolation oder Strahlungsbedingung) spielt bei der Betrachtung einer mehrere Gitterpunkte weit vom Rand ins Innere reichenden Dämpfungsschicht die Gestalt der Welle oder des Wellenpaketes eine bedeutende Rolle. Es erscheint einsichtig, daß eine einzelne Welle stärker gedämpft werden kann und damit in geringerem Maße zurückreflektiert wird, falls sie in ihrer seitlichen Ausdehnung vollständig in die Dämpfungsschicht hineinpaßt. Aus der Sicht einer sehr viel umfangreicheren Welle stellt sich die Dämpfungsschicht unter Umständen derart schmal dar, daß ihr Effekt auf denjenigen eines festen Randes reduziert wird, was gleichbedeutend ist mit vollständiger Reflexion am Rand. Auch tritt bei ausgedehnten Wellenpaketen außerhalb der Dämpfungsschicht, also im Inneren des Gebietes, eine Überlagerung der ursprünglich vorhandenen und der reflektierten Welle ein, wodurch die exakte Identifizierung der zurückgeworfenen Welle erschwert wird.

Die Diskretisierung der Funktionswerte im Gitterpunktraster führt zu einem weiteren Wellentyp, nämlich zu den sogenannten 2- Δ -Wellen. Deren Name rührt daher, daß ihre Wellenlänge gerade dem doppelten Abstand der Gitterpunkte untereinander, also der zweifachen Maschenweite $2\Delta x$ entspricht. Es handelt sich dabei um die kleinste Wellenlänge, die in dem Modell überhaupt auftreten kann. Dieser Art Wellen muß ebenfalls Beachtung geschenkt werden, denn sie entstehen bevorzugt an Grenzflächen, wo die Homogenität der diskretisierten Felder gestört ist und sich infolgedessen ein zunehmender Kontrast zwischen den geradzahligen und den ungeradzahligen Gitterpunkten (von einem beliebigen Bezugspunkt aus gezählt) aufbauen kann.

4.5.1 Behandlung einer Teilschicht

Zur Betrachtung ihrer Reflexionseigenschaften wird die Dämpfungsschicht derart in mehrere Teilschichten untergliedert, daß in deren Mittelpunkt jeweils ein Gitterpunkt zu liegen kommt. Innerhalb jeder Teilschicht soll ein konstanter Dämpfungskoeffizient herrschen, dessen Wert vom entsprechenden Bezugspunkt – also dem Mittelpunkt der betreffenden Schicht – übernommen wird. Jede derartige Teilschicht *i* besitzt dann einen festen Transmissionsfaktor T_i und einen Reflexionsfaktor R_i . Beide sind über die Beziehung $|R_i|+|T_i| = 1$ miteinander verbunden. Werden von einer Welle mehrere solcher Teilschichten hintereinander durchlaufen, so sind die jeweiligen Transmissions- bzw. Reflexionsfaktoren miteinander zu multiplizieren.

Innerhalb einer Teilschicht lautet die Dämpfungsgleichung mit festem Dämpfungskoeffizienten 0 < k < 1

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{k-1}{\Delta t} f \tag{132}$$

Diese Differentialgleichung hat die zeitabhängige Lösung

$$f(t) = f(0) \exp\left(\frac{k-1}{\Delta t}t\right)$$
(133)

Für das Durchlaufen einer Teilschicht wird die Zeit $t = \Delta x/c$ benötigt:

$$f\left(t = \frac{\Delta x}{c}\right) = f(0) \exp\left(\frac{k-1}{\Delta t} \frac{\Delta x}{c}\right) = f(0) \exp\left(\frac{k-1}{Cou}\right)$$
(134)

Der Grad der Dämpfung hängt also nicht nur von den Dämpfungskoeffizienten k_i ab, sondern auch über die Courant-Zahl $Cou = c \Delta t / \Delta x$ von den Strömungseigenschaften und von Modellparametern. Die Transmissivität einer Teilschicht beträgt folglich

$$T_i = \frac{f(t = \Delta x/c)}{f(0)} = \exp\left(\frac{k_i - 1}{Cou}\right)$$
(135)

Entsprechend gilt für die Reflektivität derselben Teilschicht

$$R_i = \pm (1 - T_i) = \pm \left[1 - \exp\left(\frac{k_i - 1}{Cou}\right)\right] \approx \pm \left(1 - 1 - \frac{k_i - 1}{Cou}\right) = \mp \frac{k_i - 1}{Cou}$$
(136)

Das Vorzeichen bei der Reflektivität liegt zunächst noch nicht fest, da genaugenommen nur die Summe der *Beträge* von Transmissions- und Reflektivitätsfaktor Eins ergeben muß. In diesem Fall gilt aber das jeweils unten stehende Vorzeichen, so daß sich nach linearer Näherung der Exponentialfunktion gemäß $\exp(x) \approx 1+x$ als Ergebnis $R_i \approx (k_i - 1)/Cou$ ergibt. Die Wahl des Vorzeichens läßt sich damit begründen, daß für den Fall $k_i = 0$, was gleichbedeutend ist mit einem festen Rand und dadurch jegliche Transmission unterbindet $(T_i = 0)$, die Reflektivität $R_i = -1$ betragen muß, weil eine Welle an der Koordinatenachse gespiegelt wieder zurückgeworfen wird.

Diese idealen Transmissivitäten bzw. Reflektivitäten werden allerdings nur im Grenzfall verschwindender Courant-Zahlen $Cou = c \Delta t / \Delta x = 0$ auch wirklich erreicht, also nur bei sehr langsam propagierenden und damit in der zeitlichen Abfolge besser erfaßbaren Wellen.

Um den Programmablauf zu beschleunigen und damit die Leistungsfähigkeit des Modells zu erhöhen, sollte möglichst nicht mehr Rechenzeit verbraucht werden als unbedingt nötig. Aus diesem Grunde ist in manchen Modellen (z.B. auch im KAMM) das Zeitinkrement Δt nicht für alle Zeiten fest vorgegeben, sondern wird in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit c flexibel bestimmt. Das bedeutet, daß der Zeitschritt Δt so groß wie möglich gewählt wird. Zu höheren Werten hin wirkt allerdings das Courantsche Stabilitätskriterium beschränkend. Aus $0 \leq c \Delta t / \Delta x \leq 1$ folgt nämlich $0 \leq \Delta t \leq 1$. In Modellen mit einer derartigen Anpassung des Zeitinkrementes Δt kann davon ausgegangen werden, daß die Courant-Zahl $Cou = c \Delta t / \Delta x$ nur wenig unter Eins liegt und deshalb näherungsweise durch diesen festen Wert ersetzbar ist.

Die oben durchgeführte Annäherung der Exponentialfunktion $exp[(k_i - 1)/Cou]$ durch den linearen Term $1 + (k_i - 1)/Cou$ verliert dann aber an Genauigkeit. Falls k_i wenig von Eins abweicht (dies bedeutet hier schwache Dämpfung – man beachte die Definition von k_i !), kann die Näherung dennoch aufrechterhalten werden. Mit $Cou \approx 1$ lautet dann die Transmissivität

$$T_i = \exp\left(\frac{k_i - 1}{Cou}\right) \approx 1 + \frac{k_i - 1}{Cou} \approx 1 + k_i - 1 = k_i$$
(137)

Für die Reflektivität gilt entsprechend

$$R_i = -\left[1 - \exp\left(\frac{k_i - 1}{Cou}\right)\right] \approx -\left(1 - 1 - \frac{k_i - 1}{Cou}\right) \approx k_i - 1 \qquad (138)$$

Vorerst soll eine Beschränkung auf innerhalb der gesamten Dämpfungsschicht durchweg konstanten Dämpfungskoeffizienten $k_i \equiv k$ und damit Transmissivitäten $T_i \equiv T$ und Reflektivitäten $R_i \equiv R$ gelten. Es bestehen dann unter anderem folgende Möglichkeiten der Entstehung einer reflektierten Teilwelle, welche – alle zusammengenommen – die gesamte zurückgeworfene Welle bilden:

- Reflexion bereits an der ersten Schicht: Teilreflektivität R
- Reflexion erst an der zweiten Schicht: Teilreflektivität $T\,R\,T=T^2\,R$
- Reflexion erst an der dritten Schicht: Teilreflektivität $T T R T T = T^4 R$

An der letzten Schicht (im vorliegenden Beispiel sei dies die vierte) ist keine Transmission mehr möglich. Die trotzdem berechenbare Transmissivität addiert sich vielmehr zu der schon vorhandenen Reflektivität. Auf welche Weise dies geschieht, hängt von der Spezifizierung des Randpunktes selbst ab. Ist bei der Nestung keinerlei Antrieb von außen vorhanden, handelt es sich also um einen festen Rand mit dem konstanten Randwert Null, dann wird der eigentlich durchzulassende Wellenteil unter Vorzeichenumkehr vollständig zurückgespiegelt. Für die Reflektivität einer Welle, die erst an der vierten (und damit hier letzten Schicht) reflektiert wird, gilt daher $T^3(-1)T^3 = -T^6$.

Selbstverständlich können auch Mehrfachreflexionen auftreten. Um deren relative Bedeutung zu erfassen, müssen sie mit den entsprechenden Hauptreflektivitäten der Einfachreflexionen verglichen werden. Die Entsprechung bezieht sich dabei auf zeitlich zusammenfallende Wellenteile, die anschließend – nach abgeschlossener Passage der Dämpfungsschicht – sich an einem gemeinsamen Ort befinden und sich dort überlagern. Die zeitliche Koinzidenz ist beispielsweise dann gegeben, wenn der erst an der dritten Schicht reflektierten Teilwelle diejenige Teilwelle zur Seite gestellt wird, die zwar zunächst bereits an der zweiten Schicht gespiegelt wird, aber anschließend auch von der ersten Schicht noch einmal in Richtung des Randes zurückgeworfen wird und somit diesen Bereich mehrfach durchläuft. Deren Reflektivität beträgt im ganzen $T R R R T = T^2 R^3$. Ein Vergleich der Reflektivitätsfaktoren dieser beiden für das Durchlaufen der Dämpfungsschicht die gleiche Zeitdauer benötigenden Teilwellen ergibt ein Verhältnis der Nebenreflektivität zur Hauptreflektivität von $(T^2 R^3)/(T^4 R) = R^2/T^2$. Bei in der Regel nur geringer Reflektivität R bleibt deren Verhältnis zur Transmissivität T = 1 - |R|deutlich unter Eins, und es ist vertretbar, die infolge von Mehrfachreflexionen auftretenden Nebenreflektivitäten vorerst unberücksichtigt zu lassen.

Zunächst sei der Fall einer im Punktegitter gut aufgelösten, also hinreichend breiten Welle behandelt. Hierbei spielen durch die Diskretisierung bedingte numerische Ungenauigkeiten kaum eine Rolle, und es kann davon ausgegangen werden, daß die fortschreitende Welle bei abgeschalteter Dämpfung keinerlei Änderung ihrer Form oder Größe unterläge. Darüberhinaus soll die Breite der Dämpfungsschicht klein sein im Vergleich zu den Ausmaßen des Wellenpaketes, so daß die eigentlich an verschiedenen Stellen entstehenden und damit im Endeffekt räumlich auseinandergezogenen Teilwellen näherungsweise als an einem gemeinsamen Ort überlagert angesehen werden können.

Für eine Welle, die an einer d Gitterpunkte breiten Dämpfungsschicht mit konstantem Koeffizienten k zurückgeworfen wird, ergibt sich deshalb als Gesamtreflektivität

$$R_{\text{gesamt}} = R \sum_{i=1}^{d-1} T^{2(i-1)} - T^{2(d-1)}$$
(139)

bzw. nach Ersetzung des Reflexionskoeffizienten gemäß R := -(1 - T), so daß nur noch eine Abhängigkeit von der Transmission T besteht

$$R_{\text{gesamt}} = (T-1) \sum_{i=1}^{d-1} T^{2(i-1)} - T^{2(d-1)}$$
(140)

In den Grenzfällen R = 0/T = 1 und R = -1/T = 0 ergibt sich jeweils die Gesamtreflektivität $R_{\text{gesamt}} = -1$. Ob innerhalb des Definitionsbereiches von $0 \leq T \leq 1$ ein Minimum der Gesamtreflektivität R_{gesamt} oder vielmehr ihres Betrages existiert, zeigt die Ableitung derselben nach T.

$$\sum_{i=1}^{d-1} T^{2(i-1)} + (T-1) \sum_{i=2}^{d-1} 2(i-1) T^{2i-3} - 2(d-1) T^{2d-3} = 0$$
(141)

Diese Gleichung läßt sich nur iterativ lösen. Die hierzu anzuwendende Iterationsvorschrift lautet

$$T^{(n+1)} = \left(\frac{T^{(n)} \sum_{i=1}^{d-1} T^{(n)^{2i}} + (T^{(n)} - 1) \sum_{i=2}^{d-1} 2(i-1) T^{(n)^{2i}}}{2(d-1)}\right)^{\frac{1}{2d}}$$
(142)

Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Tabelle 1 in Form der Transmissivitäten T_i und der Gesamtreflektivitäten R_{gesamt} in Abhängigkeit von der Breite d der Dämpfungsschicht zusammengestellt.

d	1	2	3	4	5	6	7	8
T_i	0,000	0,500	0,606	$0,\!670$	0,715	0,747	0,772	0,792
R_{gesamt}	-1,000	-0,750	$-0,\!674$	-0,635	-0,612	-0,596	-0,584	-0,575

Tabelle 1: Transmissivitäten der Einzelschichten und daraus resultierende Gesamtreflektivitäten als Funktion der Breite einer Dämpfungsschicht

Aus den verschiedenen Näherungen der Transmissivität T lassen sich die dazugehörigen Dämpfungskoeffizienten k gemäß der folgenden Formeln berechnen:

$$T = \exp\left(\frac{k-1}{Cou}\right) \implies k = 1 + Cou \ln T$$
 (143)

$$T \approx 1 + \frac{k-1}{Cou} \implies k \approx 1 + Cou(T-1)$$
 (144)

$$T \approx k \implies k \approx T$$
 (145)

4.5.2 Erweiterung auf die gesamte Dämpfungsschicht

Es soll jetzt ein Wellenpaket beliebiger Form senkrecht zur Randfläche auf die Dämpfungsschicht zulaufen. Dessen Ausgangsgestalt lasse sich durch die Werte an diskreten Punkten E_i $(i \in \mathbf{N})$ beschreiben. Nach erfolgter Dämpfung und Reflexion der verminderten Welle bleibt dann eine in den Punkten A_i diskretisierte

Restwelle übrig. Die E_i und A_i sollen allerdings kein ortsfestes, sondern vielmehr ein mit dem Wellenpaket mitwanderndes Koordinatensystem darstellen. Weil aber im folgenden die Welle stets außerhalb der eigentlichen Dämpfungsschicht betrachtet wird (also einige Zeit vor dem Erreichen der Randschicht bzw. nach vollständiger Passage derselben), läßt sich auch ein gemeinsamer Ursprung $E_1 = A_1$ dieser Koordinaten an einer beliebigen (inneren) Stelle des Integrationsgebietes festlegen.

Die einlaufende Welle habe eine Gesamtbreite von e Gitterweiten, so daß sie an den e Gitterpunkten E_1, E_2, \ldots, E_e diskretisiert werden kann. Außerhalb dieser e Gitterpunkte sei die anfängliche Auslenkung der betreffenden Funktion überall Null; es soll sich also um eine einzelne Welle ohne ein periodisch wiederkehrendes Grundmuster handeln. Die nach vollständiger Passage der Dämpfungsschicht registrierbare auslaufende Welle setzt sich dann aus verschiedenen Teilwellen zusammen, welche von unterschiedlichen Ursprungsbereichen der Originalwelle herrühren, die wiederum an verschiedenen Orten innerhalb der Dämpfungsschicht zurückgespiegelt werden. Den Anfang dieser auslaufenden Welle – bezeichnet mit A_1 – bildet der bereits beim Eintritt in die Dämpfungsschicht reflektierte vorderste Teil der einfallenden Welle. Anschließend folgt eine Überlagerung aus dem nun erst am zweiten Gitterpunkt der Dämpfungsschicht zurückgeworfenen vordersten Teil der einlaufenden Welle mit ihrem nachfolgenden Teil, der allerdings bereits beim Eintritt in die dämpfende Schicht reflektiert wird, wodurch diese beiden Teile im weiteren Verlauf – bedingt durch deren zeitliche Koinzidenz beim Austritt aus der Dämpfungsschicht – fest miteinander gekoppelt sind.¹⁰ Dieser Überlagerung wird die Bezeichnung A_2 zugeordnet. Insgesamt ergibt sich also eine in den Punkten A_1, A_2, \ldots, A_a diskretisierte auslaufende Welle, wobei deren Breite a = e + d größer ist als diejenige der ursprünglichen Welle. Bedingt durch die Breite d der Dämpfungsschicht wird das Wellenpaket nämlich etwas auseinandergezogen. Der Zusammenhang der auslaufenden mit der einlaufenden Welle über die Reflektivitäten der einzelnen Teile der Dämpfungsschicht läßt sich anschaulich in Matrixform darstellen:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ E_2 & E_1 & 0 & 0 & \dots \\ E_3 & E_2 & E_1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ T_1^2 R_2 \\ T_1^2 T_2^2 R_3 \\ \vdots \\ -T_1^2 T_2^2 T_3^2 \cdots T_{d-1}^2 \end{pmatrix}$$
(146)

In analoger Weise läßt sich auch die Reflexion einer periodisch wiederkehrenden Welle beschreiben. In diesem Fall ändert sich die Periodenlänge von p Gitterpunkten durch die Reflexion nicht, und die Matrixdarstellung lautet wie folgt:

¹⁰Dabei wird eine konstante Phasengeschwindigkeit im Inneren des Modellgebietes vorausgesetzt.

$$\begin{pmatrix} A_{1} \\ A_{2} \\ \vdots \\ A_{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{p} & E_{p-1} & \dots & E_{p-d+1} \\ E_{p-1} & E_{p-2} & \dots & E_{p-d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E_{2} & E_{1} & \dots & E_{p-d+3} \\ E_{1} & E_{p} & \dots & E_{p-d+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{1} \\ T_{1}^{2} R_{2} \\ \vdots \\ -T_{1}^{2} T_{2}^{2} \cdots T_{d-1}^{2} \end{pmatrix}$$
(147)

Als besonders vorteilhaft erweist sich diese Darstellungsform im Falle der sogenannten 2- Δ -Wellen. Deren Wellenlänge beträgt – wie der Name schon sagt – gerade die doppelte Gitterweite, also $2\Delta x$. Die Periodizität nach bereits zwei Gitterpunkten bedeutet, daß überhaupt nur zwei Funktionswerte unterschieden werden müssen, nämlich diejenigen der geradzahligen Gitterpunkte auf der einen und jene der ungeradzahligen Gitterpunkte auf der anderen Seite. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit soll angenommen werden, daß es sich dabei um die einander abwechselnden Werte +1 und -1 handelt, also um eine normierte Welle mit der Amplitude Eins. Ein eventuell überlagerter konstanter Wert muß dabei nicht berücksichtigt werden, denn dieser Fall wird bereits an anderer Stelle in Form von hinreichend breiten, also innerhalb der Dämpfungsschicht annähernd konstanten Wellen behandelt. Wie anhand der Matrixdarstellung unschwer zu erkennen ist, weisen auch die reflektierten Wellen wieder eine Periodizität von $2\Delta x$ auf:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & -1 & \dots & (-1)^{d+1} \\ -1 & +1 & \dots & (-1)^d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ T_1^2 R_2 \\ \vdots \\ -T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2 \end{pmatrix}$$
(148)

Darüberhinaus gilt sogar $A_2 = -A_1$. Der reflektierten Welle kann daher die Amplitude $|A_1| = |A_2|$ zugeordnet werden, die – verglichen mit der auf Eins normierten Amplitude der einfallenden Welle – nach Möglichkeit zu minimieren ist.

4.5.3 Lange Wellen

Ein sehr breites Wellenpaket, dessen Funktionswerte E_i sich innerhalb einer Entfernung von weniger als d Gitterweiten, also in geringerem Abstand, als es der Breite der Dämpfungsschicht entspricht, nur unwesentlich ändert, bereitet bei der analytischen Betrachtung der Reflexion die wenigsten Probleme. Wegen $E_i \approx E_{i+d}$ können die Auslenkungen des einlaufenden Wellenpaketes innerhalb der Dämpfungsschicht sogar als jeweils identisch angesehen werden. Diese räumliche Homogenität der E_i vereinfacht die obigen Matrixdarstellungen in der Weise, daß jeweils alle in einer Zeile vorkommenden Auslenkungen E_i denselben Wert E annehmen. In verschiedenen Zeilen der Matrix kann es sich dabei zwar um unterschiedliche konstante Werte handeln; dies spielt bei der Betrachtung aber überhaupt keine Rolle, da sämtliche Zeilen der Matrizengleichung in ausgeschriebener Form äquivalent sind:

$$A = E R_1 + E T_1^2 R_2 + \ldots - E T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2$$

= $E (R_1 + T_1^2 R_2 + \ldots - T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2)$ (149)

Es gilt also nur noch, die Summe aus den diversen Teilreflektivitäten (verursacht durch Reflexion in einem bestimmten Teilbereich der Dämpfungsschicht) zu minimieren. Für in allen Teilschichten gleiche Transmissionskoeffizienten $T_i \equiv T$ ist das Ergebnis bereits bekannt. Nun soll vielmehr untersucht werden, ob und inwiefern ein bestimmter Verlauf der T_i innerhalb der Dämpfungsschicht die Gesamtreflektivität R_{gesamt} noch gegenüber der einfachen Annahme identischer T_i vermindern kann. Gesucht ist also das betragsmäßige Minimum der Funktion

$$R_{\text{gesamt}} = (T_1 - 1) + T_1^2 (T_2 - 1) + \ldots + T_1^2 T_2^2 \cdots (T_{d-1} - 1) - T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2$$
(150)

Eine notwendige Bedingung stellt in dieser Hinsicht die Forderung dar, daß sämtliche partiellen Ableitungen nach den T_i verschwinden müssen. Es bietet sich an, zuerst die Differentiation nach T_{d-1} durchzuführen, weil dadurch – wie leicht zu sehen ist – bereits der gesuchte Wert von T_{d-1} festliegt, anschließend diesen nunmehr bekannten Wert in die zu minimierende Funktion einzusetzen und mit der partiellen Ableitung nach T_{d-2} fortzufahren.

$$\frac{\partial R_{\text{gesamt}}}{\partial T_{d-1}} = T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-2}^2 - 2 T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-2}^2 T_{d-1} = 0$$
(151)

Als Resultat folgt $T_{d-1} = 0.5$; dieser Wert liegt innerhalb des erlaubten Wertebereiches von $0 \leq T_i \leq 1$. Das Verfahren ist solange fortzusetzen, bis alle $T_i (i = 1, ..., d - 1)$ feststehen. Vom Rand ausgehend ergibt sich dann im optimalen Fall minimaler Reflexion die in Tabelle 2 dargestellte Folge der Transmissionsfaktoren T_i .

i	b	b - 1	b-2	b-3	b-4	b-5	b - 6	b-7
T_i	0,500	$0,\!667$	0,750	0,800	0,833	$0,\!857$	$0,\!875$	0,889

Tabelle 2: Transmissionsfaktoren als Funktion des Abstandes vom Rand

In Abhängigkeit von der Anzahl d der die Dämpfungsschicht bildenden Gitterpunkte ergibt sich dann die Gesamtreflektivität R_{gesamt} gemäß Tabelle 3.

d	1	2	3	4	5	6	7	8
$R_{\rm gesamt}$	-0,750	-0,667	-0,625	-0,600	-0,583	-0,571	-0,563	-0,556

Tabelle 3: Gesamtreflektivität als Funktion der Breite der Dämpfungsschicht

Ein Vergleich mit den Ergebnissen bei innerhalb der Dämpfungsschicht konstanten Transmissionsfaktoren $T_i \equiv T$ zeigt eine nur unwesentliche Verringerung der Gesamtreflektivität R_{gesamt} . Die größte absolute Differenz von nur 0,013 ist bei einer fünf bis sechs Gitterpunkte umfassenden Dämpfungsschicht gegeben (-0,583 gegenüber -0,596 bei d = 5; -0,571 verglichen mit -0,584 bei d = 6). Dies entspricht einer relativen Verminderung der Gesamtreflektivität R_{gesamt} um lediglich 2,2 %. Bei einem innerhalb der Dämpfungsschicht variablen Verlauf der Transmissivitäten T_i tritt also gegenüber einem konstanten Verlauf derselben kein deutlich erkennbarer Vorteil zutage.

4.5.4 Kurze Wellen

Nun soll die Reaktion der Dämpfungsschicht auf eine Einzelwelle bzw. ein Wellenpaket von vergleichbarer Breite mit den Abmessungen des Gebietes, innerhalb welchem die Dämpfung stattfindet, untersucht werden. Wellen dieser Größenordnung erweisen sich als äußerst problematisch, gilt es doch, mit von den Strömungseigenschaften unbeeinflußten Dämpfungskoeffizienten k_i gleichermaßen folgende beiden konträren Wellentypen zufriedenstellend an zu starker Reflexion zu hindern:

Ein Teil der Wellen soll hier als gerade Wellen bezeichnet werden. Diese Wellen zeichnen sich nämlich dadurch aus, daß das Muster ihrer Auslenkung mehr oder weniger Achsensymmetrie besitzt. Ein Beispiel hierfür stellt die Gaußsche Glockenkurve $f(x) = \exp(-x^2)$ dar. Wenn demgegenüber von ungeraden Wellen die Rede ist, so sind damit annähernd punktsymmetrische Wellen gemeint. Dies trifft beispielsweise auf reine Sinus-Wellen der Form $f(x) = \sin(x)$ zu. Wie die nachfolgenden Ausführungen zeigen werden, ist es schlechterdings unmöglich, einen optimalen Verlauf der Dämpfungskoeffizienten k_i zu ermitteln, mithilfe dessen gleichzeitig beide derartige Extremfälle abgedeckt werden können.

Stellvertretend für die geraden Wellen sei eine Rechteckwelle¹¹ betrachtet, die über die Funktion $f(x) = E \Theta(e/2 - |x|)$ definiert ist. Der Parameter *e* steht dabei wie bisher für die Breite des einfallenden Wellenpaketes. Aus der Matrixdarstellung (146) geht hervor, daß die maximale Auslenkung der auslaufenden Welle in

¹¹Die numerische Simulierung von exakten Rechteckwellen ist bedingt durch den idealerweise senkrechten Abfall des Funktionsverlaufes natürlich nicht möglich. Sie dienen in der vorliegenden analytischen Betrachtung deshalb nur anschaulichen Zwecken.

ihrem mittleren Bereich auftritt. Unter Verwendung der Breite a dieser auslaufenden Welle handelt es sich dabei genauer gesagt um die maximale Auslenkung $A_{a/2}$. Daß dieser Wert tatsächlich das Extremum der reflektierten Welle darstellt, liegt daran, weil sämtliche diskretisierten Auslenkungen $E_i \equiv E$ der einlaufenden Welle dasselbe Vorzeichen aufweisen. Gleiches gilt auch für die Teilreflektivitäten an den einzelnen Teilschichten ($R_i = T_i - 1 \leq 0$ wegen $0 \leq T_i \leq 1$; die am Randpunkt selbst reflektierte Welle besitzt sowieso stets ein negatives Vorzeichen – fester Rand!). Gemäß (146) folgt für diese maximale Auslenkung

$$A_{a/2} = E R_1 + E T_1^2 R_2 + \ldots - E T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2$$

= $E (R_1 + T_1^2 R_2 + \ldots - T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2)$ (152)

Ein Stellvertreter der *ungeraden* Wellen sei durch die Stufenfunktion $f(x) = E \Theta(1 - |x|) x/|x|$ definiert. In der Mitte der auslaufenden Welle ist nun kein Extremum mehr zu erwarten, vielmehr neigen die Komponenten mit +E und -E in der Auslenkung $A_{a/2}$ dazu, sich gegenseitig zu kompensieren. Die auslaufende Welle weist allerdings eine deformierte Form des ungeraden Wellentyps auf – mit zwei Extremwerten unterschiedlichen Vorzeichens bei $A_{a/4}$ und $A_{3a/4}$.

$$A_{a/4} = +E\left(R_1 + T_1^2 R_2 + \ldots + T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d/2-1}^2 R_{d/2}^2\right)$$
(153)

$$A_{3a/4} = -E\left(T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d/2}^2 R_{d/2+1}^2 + \dots - T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2\right)$$
(154)

Ist eine möglichst geringe Gesamtreflektivität R_{gesamt} gefordert, so sind dabei beide Extremwerte $A_{a/4}$ und $A_{3a/4}$ zu berücksichtigen. Das Minimum $A_{a/4} < 0$ (wegen $R_i = T_i - 1 < 0$) weist dann die geringsten Absolutbeträge auf, wenn $R_1 \approx R_2 \approx \ldots \approx R_{d/2} \approx 0$ gilt und aufgrund $R_i = T_i - 1$ entsprechend die einzelnen Transmissivitäten $T_1, T_2, \ldots, T_{d/2}$ nahe bei Eins liegen. Wie nämlich bereits gezeigt wurde, bringt ein variabler Verlauf der Transmissionsfaktoren T_i innerhalb der Dämpfungsschicht praktisch keinerlei nennenswerten Vorteil gegenüber einem optimierten durchweg konstanten Wert, so daß es durchaus gestattet ist, ohne allzu große Einschränkung eine solche konstante Transmissivität $T_i \equiv T$ der einzelnen Teilschichten anzunehmen. Das Maximum $A_{3a/4} > 0$ ist hingegen dann am geringsten, wenn – im Falle $T_i \equiv T - T_1 \approx T_2 \approx \ldots \approx T_{d-1} \approx 1$, also alle T_i verschwinden; es reicht aber bereits, wenn nur eines der $T_1, T_2, \ldots, T_{d/2}$ verschwindet, da diese zugleich in jedem Summand auftreten. An dieser Stelle zeigt sich bereits der Widerspruch: Um die geringsten positiven Werte zu erhalten (an der Stelle 3a/4), soll T_i ($1 \le i \le d/2$) möglichst nahe bei Null liegen. Die kleinsten negativen Ausschläge (an der Stelle a/4) treten im Gegensatz dazu für Werte der T_i $(1 \le i \le d/2)$ auf, die möglichst wenig von Eins abweichen. Wie oben bereits dargelegt wurde, sind für sehr breite Wellen, die im Hinblick auf die Dimensionierung der Dämpfungsschicht annähernd homogene Funktionswerte aufweisen, Transmissivitäten im Bereich zwischen 0,5 und 0,9 ideal. Alle diese Fälle können selbstverständlich niemals von einer – wie auch immer gearteten – Dämpfungsschicht gleichermaßen erfolgreich bewältigt werden; man kommt vielmehr nicht umhin, Prioritäten zu setzen zugunsten derjenigen Wellentypen, die unter allen Umständen nur stark vermindert zur Reflexion gelangen sollen. Zwangsläufig bedeutet dies allerdings für Wellenpakete bestimmten Ausmaßes ungünstigere Dämpfungs- und damit Reflexionseigenschaften, was aber in Kauf genommen werden kann, sofern es sich dabei um – der Wahrscheinlichkeit nach zu urteilen – eher seltene Erscheinungen handelt.

Bleibt abschließend noch, das Verhalten der Wellen mit der kürzestmöglichen Wellenlänge, der sogenannten 2Δ -Wellen, bezüglich der Dämpfungsschicht zu untersuchen. Gemäß der Matrixdarstellung (148) bewirken sie folgende Gesamtreflektivität R_{gesamt} , die sich aus der Amplitude der zurückgeworfenen 2Δ -Welle ergibt:

$$R_{\text{gesamt}} = \pm (R_1 - T_1^2 R_2 + T_1^2 T_2^2 R_3 - \dots (-1)^d T_1^2 T_2^2 T_3^2 \cdots T_{d-1}^2)$$
(155)

Der Betrag dieser Reflektivität ist durch geeignete Wahl der T_i zu minimieren. Durch die in der Funktion auftretenden alternierenden Vorzeichen ist es problemlos möglich, fast beliebig kleine, nur wenig von Null abweichende Gesamtreflektivitäten zu erhalten, sofern die Teilreflektivitäten benachbarter Schichten nahe beieinander liegen. Letzteres ist mit zunehmender Breite der Dämpfungsschicht unter Annahme eines monotonen Verlaufes der T_i in zufriedenstellender Weise gegeben. Obwohl an dieser Stelle bereits anklingt, daß die 2- Δ -Wellen – zumindest bei der hier gewählten Betrachtungsweise – kaum Probleme bei der Reflexion bereiten, seien dennoch der Vollständigkeit halber die mit den bereits bekannten, oben angewandten Methoden berechneten optimalen Werte der Transmissionsfaktoren T_i wiedergegeben, die zu minimaler Reflexion der 2 Δ -Wellen in der Dämpfungsschicht führen. Bei Annahme räumlich homogener, also durchweg konstanter $T_i \equiv T$ ergibt sich das in Tabelle 4 wiedergegebene Resultat.

d	1	2	3	4	5	6	7	8
T_i	0,618	0,640	0,755	0,733	0,813	0,784	0,847	0,816
$R_{\rm gesamt}$	0,000	$0,\!380$	0,000	$0,\!243$	$0,\!001$	$0,\!180$	$0,\!000$	$0,\!145$

Tabelle 4: Gesamtreflektivität der Dämpfungsschicht gegenüber 2- Δ -Wellen

Es genügt also bereits, wenn die Dämpfung der Funktionswerte an nur einem Gitterpunkt durchgeführt wird. Die Gesamtreflexion beträgt dann nämlich $R_{\text{gesamt}} = T - 1 + T^2$. Diese Funktion hat innerhalb des Wertebereiches von 0 < T < 1 eine Nullstelle bei $T = (-1 + \sqrt{5})/2 \approx 0.618$. Dabei handelt es sich selbstverständlich gleichzeitig auch um das Minimum des Betrages von R_{gesamt} , so daß die Forderung nach geringstmöglicher Reflexion damit erfüllt ist.

4.5.5 Unterdrückung kurzwelliger Störungen

In der Praxis stellt sich das Problem der 2- Δ -Welle normalerweise nicht in der hier betrachteten Weise, sondern in einer etwas anderen Form. Die durch diese Art Wellen verursachte Reflexion alleine ist nämlich nur bedingt aussagekräftig, vielmehr kommt die eigentliche Bedeutung erst der Überlagerung von einfallender und zurückreflektierter Welle zu. Bisher wurde streng zwischen diesen beiden gegenläufigen Wellen unterschieden. Das war deshalb möglich, weil die Wellen in Form von räumlich begrenzten Wellenpaketen betrachtet wurden. Bei den 2- Δ -Wellen handelt es sich aber dem Wesen nach um periodisch wiederkehrende Strukturen, die durch numerische Effekte entstehen und sich resonanzähnlich mit der Zeit aufschaukeln können. Gerade dies gilt es zu verhindern, indem die Randbedingungen so gewählt werden, daß im Randbereich beinahe zwangsläufig entstehende oder sich verstärkende derartige Wellen mit der Wellenlänge $2\Delta x$ nachhaltig unterdrückt werden. Im folgenden soll hierzu der Argumentation von Lehmann (1993) gefolgt werden.

Der Einfachheit halber soll als prognostisches Modell eine reine Advektionsgleichung dienen. In der Dämpfungsschicht führt dies zu folgender Gleichung:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = -k f \tag{156}$$

Wird die darin vorkommende Ortsableitung $\partial f / \partial x$ durch eine zentrierte Differenz ersetzt, so lautet die nunmehr an den Gitterpunkten diskretisierte Gleichung:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{c}{2\Delta x} \left(f_{i+1} - f_{i-1} \right) = -k_i f_i \tag{157}$$

Die Dämpfungsschicht liege im Bereich der d Gitterpunkte i = 1, 2, ..., d. Es gilt dann $k_i > 0$ für $1 \le i \le d$. Für alle übrigen Werte von i ist hingegen $k_i \equiv 0$. Im stationären Zustand vereinfacht sich die diskretisierte Gleichung zu

$$\frac{c}{2\Delta x}(f_{i+1} - f_{i-1}) = -k_i f_i \tag{158}$$

Außerhalb der Dämpfungsschicht, also im Inneren des Gebietes, folgt daraus wegen $k_i \equiv 0$ die Beziehung $f_{i+1} = f_{i-1}$, wodurch eine Welle mit der Wellenlänge $2\Delta x$, nämlich der doppelten Gitterweite, charakterisiert ist. Dieser numerisch bedingten Welle wird die als Anfangsbedingung vorgegebene konstante Welle $f_i = \bar{f} = \text{const.}$ überlagert. Die Amplitude der 2Δ -Welle wird als proportional zur Auslenkung \overline{f} der einfallenden Welle angenommen. Die Proportionalitätskonstante r läßt sich auch als Reflexionskoeffizient auffassen. Diese Interpretation läßt sich damit begründen, daß die reflektierte Welle und damit auch deren Amplitude von der Auslenkung der sie verursachenden einfallenden Welle abhängt und bei Verschwinden der letzteren ebenfalls vollständig zum Erliegen kommen muß. An den einzelnen Gitterpunkten wechseln sich deshalb die Funktionswerte folgendermaßen ab:

$$f_{2i-1} = \bar{f} + r \bar{f} = (1+r) \bar{f}$$
(159)

$$f_{2i} = \bar{f} - r\bar{f} = (1 - r)\bar{f}$$
 (160)

Das Verhältnis aus den Auslenkungen an zwei benachbarten Gitterpunkten beträgt also $f_{2i}/f_{2i-1} = (1-r)/(1+r)$. Einen alternativen Ausdruck für diesen Wert erhält man bei Betrachtung der diskretisierten stationären Dämpfungsgleichung im Gebiet mit $k_i > 0$.

$$-f_{d-1} + k_{d}^{\star} f_{d} = 0$$

$$f_{d} - f_{d-2} + k_{d-1}^{\star} f_{d-1} = 0$$

$$\vdots$$

$$f_{3} - f_{1} + k_{2}^{\star} f_{2} = 0$$

$$f_{2} - f_{0} + k_{1}^{\star} f_{1} = 0$$
(161)

Dabei sind in $k_i^{\star} := 2 \Delta x/c k_i$ die auftretenden Konstanten zusammengefaßt worden. Der Reihe nach ergibt sich anschließend durch Einsetzen der jeweils zuvor berechneten Werte

$$f_{d} = \frac{1}{k_{d}^{\star}} f_{d-1}$$

$$f_{d-1} = \frac{1}{k_{d-1}^{\star} + \frac{1}{k_{d}^{\star}}} f_{d-2}$$

$$\vdots$$

$$f_{1} = \frac{1}{k_{1}^{\star} + \frac{1}{k_{2}^{\star} + \ldots + \frac{1}{k_{d}^{\star}}}} f_{0}$$
(162)

Am Übergang in die Dämpfungsschicht können die beiden Ausdrücke gleichgesetzt werden.

$$\frac{f_0}{f_1} = \frac{1-r}{1+r} = k_1^{\star} + \frac{1}{k_2^{\star} + \ldots + \frac{1}{k_d^{\star}}}$$
(163)

Der Reflexionskoeffizient beträgt dann

$$r = \frac{1 - k_1^{\star} - \frac{1}{k_2^{\star} + \dots + \frac{1}{k_d^{\star}}}}{1 + k_1^{\star} + \frac{1}{k_2^{\star} + \dots + \frac{1}{k_d^{\star}}}}$$
(164)

Die Dämpfungskoeffizienten k_i sind so zu berechnen, daß für einen Bereich der Wellengeschwindigkeit $c_{\min} \leq c \leq c_{\max}$ bzw. – was äquivalent ist – der Courant-Zahl $Cou_{\min} \leq Cou \leq Cou_{\max}$ der maximal mögliche Reflexionskoeffizient minimiert wird. Die kleinste, noch zu berücksichtigende Wellengeschwindigkeit ist durch die gesamte Integrationszeit T in Verbindung mit der Dicke d der Dämpfungsschicht gemäß $c_{\min} = 2 d \Delta x/T$ vorgegeben. Mit dieser Geschwindigkeit propagierende Wellen legen innerhalb der Simulationszeit einen der doppelten Breite der Dämpfungsschicht entsprechenden Weg zurück und können deshalb gerade die Dämpfungsschicht in voller Länge durchlaufen, ohne danach im Inneren des Gebietes noch Reaktionen hervorzurufen. Die größte zugelassene Wellengeschwindigkeit ist durch das Courantsche Stabilitätskriterium $c \Delta t/\Delta x \leq 1$ vorgegeben; demnach gilt $c_{\max} = \Delta x/\Delta t$.

Gesucht wird also das Minimum der Reflektivität |r(Cou)|:

$$\min_{K_1^+,\dots,K_d^+} \left\{ \max_{Cou} \left\{ |r(Cou)|, \ Cou_{\min} \le Cou \le Cou_{\max} \right\} \right\}$$
(165)

Zunächst werden dazu einige vereinfachende Schreibweisen eingeführt. Mit $b := Cou^{-1}$ und $K_k^+ := 2 \alpha_k$ folgt

$$K_k^{\star} = \frac{2\,\alpha_k}{Cou} = K_k^+ \,b \tag{166}$$

Nach längerer Rechnung (ausgehend von einer Optimalitätsbedingung) kommt Lehmann auf einen Algorithmus, mithilfe dessen im Falle, daß d eine Zweierpotenz darstellt, sich der am besten geeignete Verlauf der α_k auf einfache Weise induktiv berechnen läßt. Die Beschränkung von d auf Potenzen mit der Basis Zwei stellt dabei keine wesentliche Beeinträchtigung dar, weil diese Werte von d der gängigen Praxis entsprechen. Üblich ist d = 8, es wird aber auch teilweise mit d = 4operiert.

Als Startwerte des Algorithmus dienen die Zahl $\mu_1 := \sqrt{Cou_{\text{max}}/Cou_{\text{min}}}$, in die das Verhältnis aus größter und kleinster Courant-Zahl eingeht, sowie die beiden Polynome in $b, P_1(b) = b$ und $Q_1(b) = 1$. Sind μ_k und die Funktionen $P_k(b)$ und

 $Q_k(b)$ bekannt, so lassen sich daraus über die folgende Induktionsvorschrift die entsprechenden Werte mit dem Index 2 k berechnen:

$$\mu_{2k} := \sqrt{\frac{\mu_k + \frac{1}{\mu_k}}{2}} \tag{167}$$

$$P_{2k} := P_k^2 + Q_k^2 \tag{168}$$

$$Q_{2k} := 2 \,\mu_{2k} \,P_k \,Q_k = \sqrt{2 \,\left(\mu_k + \frac{1}{\mu_k}\right)} \,P_k \,Q_k \tag{169}$$

Sowohl P_{2k} als auch Q_{2k} stellen dann wieder ganzrationale Polynome in b dar, wenn dies bereits auf die Vorgängerfunktionen $P_k(b)$ und $Q_k(b)$ zutrifft.

Die Induktion ist solange fortzusetzen, bis die Funktionen $P_d(b)$ und $Q_d(b)$ festliegen. Wie Lehmann in seinen Ausführungen zeigt, entspricht deren Verhältnis gerade dem gesuchten Kettenbruch:

$$\frac{P_d(b)}{Q_d(b)} = K_1^+ b + \frac{1}{K_2^+ b + \ldots + \frac{1}{K_1^+ b}}$$
(170)

Dieser Kettenbruch liegt demnach in einer aufgelösten Form als Quotient zweier Polynome in *b* vor. Die Koeffizienten K_1^+, \ldots, K_d^+ lassen sich dann aber ohne weiteres aus dieser Darstellung ermitteln. Mit $\mu := \sqrt{Cou_{\text{max}}/Cou_{\text{min}}}$ gilt beispielsweise:

$$\frac{P_2(b)}{Q_2(b)} = \frac{K_1^+ K_2^+ b^2 + 1}{K_2^+ b} = \frac{b^2 + 1}{\sqrt{2 (\mu + \frac{1}{\mu})} b}$$
(171)
$$\frac{P_4(b)}{Q_4(b)} = \frac{K_1^+ K_2^+ K_3^+ K_4^+ b^4 + (K_1^+ K_2^+ + K_1^+ K_4^+ + K_3^+ K_4^+) b^2 + 1}{K_2^+ K_3^+ K_4^+ b^3 + (K_2^+ + K_4^+) b}$$

$$= \frac{b^4 + 2 (1 + \mu + \frac{1}{\mu}) b^2 + 1}{2 \sqrt[4]{\frac{\mu + \frac{1}{\mu}}{2}} \sqrt{\mu + \frac{1}{\mu} + 2} (b^3 + b)}$$
(171)

Tritt anstelle eines ganzen Spektrums von Courant-Zahlen $Cou_{\min} \leq Cou \leq Cou_{\max}$ nur eine einzige auf, gilt also $\mu = \sqrt{Cou_{\max}/Cou_{\min}} = 1$, dann vereinfachen sich diese Ausdrücke und lassen Vergleiche mit den früher erhaltenen Ergebnissen von Verläufen der Dämpfungskoeffizienten α_k zu.

$$\frac{P_2(b)}{Q_2(b)} = \frac{K_1^+ K_2^+ b^2 + 1}{K_2^+ b} = \frac{b^2 + 1}{2b}$$
(173)
$$\frac{P_4(b)}{Q_4(b)} = \frac{K_1^+ K_2^+ K_3^+ K_4^+ b^4 + (K_1^+ K_2^+ + K_1^+ K_4^+ + K_3^+ K_4^+) b^2 + 1}{K_2^+ K_3^+ K_4^+ b^3 + (K_2^+ + K_4^+) b}$$

$$= \frac{b^4 + 6b^2 + 1}{4b^3 + 4b}$$
(174)

Im einzelnen ergeben sich die in Tabelle 5 dargestellten Resultate.

d	Cou	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	$r_{\rm max}$
2	1	0,667	0,333							0,000
2	0,1	0,167	0,048							0,000
2	0,01	0,020	$0,\!005$							0,000
2	0,1-1	$0,\!455$	$0,\!107$							-0,137
2	0,01-1	0,310	0,022							-0,348
2	0,001-1	0,201	0,004							-0,598
4	1	0,762	$0,\!610$	0,444	0,200					0,000
4	0,1	0,242	$0,\!135$	$0,\!074$	0,024					0,000
4	0,01	0,031	0,015	0,008	0,002					0,000
4	0,1-1	0,598	0,349	$0,\!176$	$0,\!056$					-0,009
4	0,01-1	$0,\!498$	$0,\!176$	$0,\!047$	0,009					-0,074
4	0,001-1	0,419	0,082	0,011	0,001					-0,185
8	1	0,827	0,731	$0,\!652$	$0,\!575$	$0,\!492$	$0,\!396$	$0,\!276$	$0,\!111$	0,000
8	0,1	0,323	0,214	$0,\!158$	0,119	0,088	0,062	0,037	0,012	0,000
8	0,01	0,046	0,027	0,018	0,013	0,010	0,007	0,004	$0,\!001$	0,000
8	0,1-1	0,701	0,537	0,407	0,300	0,214	0,144	0,084	0,029	0,000
8	0,01-1	0,629	0,404	0,237	0,128	0,066	0,033	0,016	0,005	-0,003
8	0,001-1	0,573	0,300	0,130	0,051	0,019	0,007	0,003	0,001	-0,017

Tabelle 5: Verläufe des Dämpfungskoeffizienten α_i unter verschiedenen Nebenbedingungen [nach Lehmann(1993)]

Zum Vergleich bieten sich die 1977 von Kållberg angegebenen empirischen, nach der Formel $\alpha_k = 1 - \tanh(0.5 k)$ berechneten Kombinationskoeffizienten an (Tabelle 6).

Die Abbildungen 3 und 4 zeigen den Verlauf des Mischungskoeffizienten α_i im Randbereich. In Abbildung 3 sind konstante, den gesamten Integrationszeitraum über unveränderliche Koeffizienten dargestellt (nach Angaben aus der Literatur), wohingegen die Abbildung 3 unter Berücksichtigung der gerade vorherrschenden Courantzahl *Cou* stets neu zu berechnende Werte beinhaltet. Es sind dabei sowohl

α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	$lpha_6$	α_7	α_8
0,538	0,238	0,095	0,036	0,013	0,005	0,002	0,001

Tabelle 6: Verlauf der Mischungskoeffizienten nach Kållberg (1977)

homogene, d.h. in der gesamten Mischungsschicht identische, als auch inhomogene, d.h. vom Abstand zum Randpunkt abhängige Koeffizienten aufgeführt.



Abbildung 3: Konstante Mischungskoeffizienten α_i in Abhängigkeit vom Abstand zum Rand

Sowohl in Abbildung 3 als auch in Abbildung 4 zeigt sich, daß Strömungen mit größeren Courantzahlen generell auch größere Werte der Mischungs- bzw. Dämpfungskoeffizienten benötigen, also einer stärkeren Dämpfung bedürfen. Dies hängt mit der unterschiedlichen Fortbewegungsgeschwindigkeit (in Gitterpunkten je Zeiteinheit) zusammen: Geringere Courantzahlen gehören zu Wellen, die sich länger in der Dämpfungsschicht aufhalten und deshalb trotz geringerer Dämpfungskoeffizienten zufriedenstellend abgeschwächt werden können. Nach Abbildung 4 stellen die homogenen Mischungskoeffizienten in guter Näherung das arithmetische Mittel der inhomogenen Entsprechungen dar.

4.6 Das Verhalten der Anpassungsschicht gegenüber einem äußeren Antrieb

Bisher wurde der Verlauf der Kombinationskoeffizienten α_i in der Anpassungsschicht bereits als monoton steigend vorausgesetzt, wobei als Grenzfall auch



homogen für Cou = $0,01 \Leftrightarrow$ homogen für Cou = 0,1 +homogen für Cou = $1 \square$ inhomogen für Cou = $0,01 \times$ inhomogen für Cou = $0,1 \triangle$ inhomogen für Cou = $1 \star$

Abbildung 4: Variable, von der aktuellen Courantzahl Cou abhängige Mischungskoeffizienten $\alpha_i(Cou)$ in Abhängigkeit vom Abstand zum Rand

 $\alpha_i \equiv \alpha$, also ein unveränderlicher Wert der Dämpfungskoeffizienten zugelassen wurde. Im inneren, vom externen Antrieb unbeeinflußten Bereich des hochaufgelösten Modells gilt $\alpha_i \equiv 0$, weil dort keine Vermischung der Funktionswerte fund \tilde{f} der beiden Gebiete stattfinden soll. Hinsichtlich des Randpunktes selbst erscheint es dagegen zunächst zweckmäßig, dort generell $\alpha_b = 1$ zu fordern, um die vollständige Adaption von außen kommender Wellen sicherzustellen. Unterscheiden sich die beiden Modelle nur in der räumlichen Auflösung ihrer Gitternetze und ist vor allem die Physik in beiden Gebieten dieselbe, so verhält sich eine am Randpunkt vollständig übernommene Welle im nunmehr besser aufgelösten Bereich nicht wesentlich anders, als es der Fortschreibung ihres Bewegungszustandes im äußeren Modell entspräche. Dennoch auftretende Differenzen beim Übergang von einem Netz mit gröberer Maschenweite in ein entsprechend feiner geknüpftes, welche von der Art der Interpolation der Funktionswerte an den zusätzlich hinzukommenden Gitterpunkten herrühren, sollen dabei vorerst unberücksichtigt bleiben.

Für den äußersten Punkt der Anpassungsschicht $\alpha_b = 1$ zu fordern, erweist sich bei näherer Betrachtung letztlich aber nur dann als unbedingt notwendig, wenn die Anpassungsschicht wirklich nur aus diesem einen Punkt bestünde (und damit überhaupt keine "Schicht" im eigentlichen Sinne mehr darstellen würde). Tatsächlich genügen bereits geringere Werte der α_i in der Anpassungsschicht, um eine weitgehende Übertragung der von außen kommenden Wellen ins Innere zu ermöglichen. Dies gelingt um so besser, je breiter die Anpassungsschicht ist, weil dann auch bereits kleinere Mischungsverhältnisse α_i ausreichen: Am Randpunkt wird der Anteil α_b ($0 \le \alpha_b \le 1$) des Funktionswertes des äußeren Gebietes übernommen; dort gilt also $f_b = \alpha_b \tilde{f}_b$. Wären alle anderen α_i (i < b) identisch Null, so würde die um den Faktor α_b verminderte Welle weiter ins Innere transportiert. Nun hat aber normalerweise auch α_{b-1} einen endlichen, von Null verschiedenen Wert, so daß an der Stelle x_{b-1} der dortige Wert des äußeren Modells zu einem Anteil von α_{b-1} übernommen wird. Dazu ist jetzt aber noch der sich bereits im inneren Gebiet befindliche Teil der Welle zu addieren. Gemäß der Linearkombination $f_i := \alpha_i \tilde{f}_i + (1 - \alpha_i) f_i$ hat dies mit dem Faktor $(1 - \alpha_i)$ zu geschehen, so daß sich am Punkt x_{b-1} insgesamt folgender Funktionswert ergibt:

$$f_{b-1} = \alpha_{b-1} \tilde{f}_{b-1} + (1 - \alpha_{b-1}) f_{b-1} = \alpha_{b-1} \tilde{f}_{b-1} + (1 - \alpha_{b-1}) \alpha_b \tilde{f}_{b-1} = [\alpha_{b-1} + (1 - \alpha_{b-1}) \alpha_b] \tilde{f}_{b-1}$$
(175)

Die dabei zur Verwendung kommende Beziehung $f_{b-1} = \alpha_b \tilde{f}_{b-1}$ folgt aus dem entsprechenden Ausdruck $f_b = \alpha_b \tilde{f}_b$ unter Berücksichtigung des gleichartigen, parallelen Verlaufes der Welle in den beiden einander überlagerten Gebieten.

Dieses Verfahren läßt sich entsprechend fortsetzen, bis die gesamte Anpassungsschicht durchlaufen ist und die Welle von nun an ungehindert weiter ins Innere des hochauflösenden Modellbereiches hinein propagieren kann. Die nächsten Beziehungen lauten dann:

$$f_{b-2} = \{\alpha_{b-2} + (1 - \alpha_{b-2}) [\alpha_{b-1} + (1 - \alpha_{b-1}) \alpha_b] \} \tilde{f}_{b-2}$$
(176)
$$f_{b-3} = \langle \alpha_{b-3} + (1 - \alpha_{b-3}) \{\alpha_{b-2} + (1 - \alpha_{b-2}) [\alpha_{b-1} + (1 - \alpha_{b-1}) \alpha_b] \} \rangle \tilde{f}_b (137)$$

Für ein einfaches Zahlenbeispiel zur Demonstration der Wirksamkeit des äußeren Antriebes soll es genügen, konstante $\alpha_i \equiv \alpha$ zu betrachten. Dann lassen sich die obigen Gleichungen auch in ausmultiplizierter Form übersichtlich darstellen:

$$f_b = \alpha \tilde{f}_b \tag{178}$$

$$f_{b-1} = (2\alpha - \alpha^2) f_{b-1} \tag{179}$$

$$f_{b-2} = (3\alpha - 3\alpha^2 + \alpha^3) \tilde{f}_{b-2}$$
(180)

$$f_{b-3} = (4\alpha - 6\alpha^2 + 4\alpha^3 - \alpha^4) \tilde{f}_{b-3}$$
(181)

$$f_{b-4} = (5\alpha - 10\alpha^2 + 10\alpha^3 - 5\alpha^4 + \alpha^5)\tilde{f}_{b-4}$$
(182)

$$f_{b-5} = (6\alpha - 15\alpha^2 + 20\alpha^3 - 15\alpha^4 + 6\alpha^5 - \alpha^6)\tilde{f}_{b-5}$$
(183)

$$f_{b-6} = (7\alpha - 21\alpha^2 + 35\alpha^3 - 35\alpha^4 + 21\alpha^5 - 7\alpha^6 + \alpha^7) f_{b-6}$$
(184)

$$f_{b-7} = (8\alpha - 28\alpha^2 + 56\alpha^3 - 70\alpha^4 + 56\alpha^5 - 28\alpha^6 + 8\alpha^7 - \alpha^8)\tilde{f}_{b-7}(185)$$

Tabelle 7 gibt die allmähliche Anpassung des inneren Modells an eine von außen vorgegebene Auslenkung in Abhängigkeit von den konstanten Anpassungskoeffizienten $\alpha_i \equiv \alpha$ und der Entfernung von der Randfläche wieder.

	$\alpha = 0,1$	$\alpha = 0,3$	$\alpha = 0,5$	$\alpha = 0,7$	$\alpha = 0,9$
f_b/\widetilde{f}_b	$0,\!100$	0,300	0,500	0,700	0,900
f_{b-1}/\tilde{f}_{b-1}	$0,\!190$	0,510	0,750	0,910	0,990
f_{b-2}/\tilde{f}_{b-2}	$0,\!271$	$0,\!657$	$0,\!875$	$0,\!973$	0,999
f_{b-3}/\tilde{f}_{b-3}	0,344	0,760	$0,\!938$	$0,\!992$	1,000
f_{b-4}/\tilde{f}_{b-4}	0,410	0,832	0,969	$0,\!998$	1,000
f_{b-5}/\tilde{f}_{b-5}	0,469	0,882	0,984	0,999	1,000
f_{b-6}/\tilde{f}_{b-6}	0,522	0,918	0,992	1,000	1,000
f_{b-7}/\tilde{f}_{b-7}	$0,\!570$	0,942	0,996	1,000	1,000

Tabelle 7: Anpassung des Nestes an einen äußeren Antrieb

4.7 Verringerung der Phasengeschwindigkeit in der Anpassungsschicht

Wie bereits gezeigt wurde, ist die Phasengeschwindigkeit im genesteten Gebiet größer als im alles umfassenden breitmaschigeren. Nach Abbildung 5 ist dann bei Propagation von links nach rechts der im feineren Gebiet verlaufende Wellenzug schneller als der im gröberen Gebiet verbleibende [Paschen (1980)].

Der Wert f' im feineren Gebiet entspricht im gröberen gerade \tilde{f} , eilt hinsichtlich der Phase aber um Δx voraus. Dort, wo im gröberen Gebiet der Wert \tilde{f} herrscht, sei f der an derselben Stelle auftretende Wert des genesteten Gebietes, so daß infolge der gewichteten Mittelung der einander entsprechenden Werte beider Modelle gemäß $f := \alpha(x) \tilde{f} + [1 - \alpha(x)] f$ hier gilt:

$$f := f + \alpha(x) \left(\tilde{f} - f\right) \tag{186}$$

Wegen $\tilde{f} = f'$ folgt weiter

$$f := f + \alpha(x) \,\Delta x \,\frac{f' - f}{\Delta x} \approx f + \hat{\alpha}(x) \,\frac{\partial f}{\partial x} \tag{187}$$

Dabei wird der modifizierte Mischungskoeffizient $\hat{\alpha}(x) := \alpha(x) \Delta x$ eingeführt. Als einfachste Anwendung soll wieder die Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ mit konstanter Phasengeschwindigkeit c dienen. Wird diese in Gleichung (187) eingesetzt, so ergibt sich



Abbildung 5: Auswirkung der vergrößerten Phasengeschwindigkeit im Nest

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \hat{\alpha}(x) \frac{\partial^2 f}{\partial x \,\partial t} + c \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial x} + \hat{\alpha}(x) \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) = 0$$
(188)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \left(1 + \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial x}\right) \frac{\partial f}{\partial x} + \alpha(x) \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} + c \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) = 0$$
(189)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \left(1 + \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial x}\right) \frac{\partial f}{\partial x} + \alpha(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x}\right) = 0$$
(190)

Im Inneren des eingebetteten feinskaligeren Gebietes, also außerhalb der Mischungsschicht, unterliegt der Wert f keinerlei Änderungen durch äußere Einflüsse. Wegen $\alpha \equiv 0$ (und damit auch $\partial \alpha / \partial x \equiv 0$) folgt dann in diesem ungestörten zentralen Bereich $\partial f / \partial t + c \partial f / \partial x = 0$, dort gilt also die reine Advektionsgleichung. In der Randzone kommt hingegen bedingt durch $\alpha \neq 0$ der Dämpfungsterm $\alpha(x) \partial / \partial x (\partial f / \partial t + c \partial f / \partial x)$ hinzu. Zusätzlich erfährt die Phasengeschwindigkeit im Randbereich eine Modifikation gemäß $\hat{c} := c (1 + \partial \hat{\alpha} / \partial x)$. Beim Eintritt in die Mischungszone nimmt der Einfluß des äußeren, steuernden Modelles ab, also gilt $\partial \hat{\alpha} / \partial x < 0$, und die Phasengeschwindigkeit $\hat{c} = c (1 + \partial \hat{\alpha} / \partial x) < c$ verringert sich im Vergleich zu ihrem wahren Wert c. Demgegenüber wird die Welle am Ausflußrand des genesteten Gebietes beschleunigt, da wegen der Zunahme des Einflusses von außen auch $\hat{\alpha}(x)$ wieder ansteigt, was in $\partial \hat{\alpha} / \partial x > 0$ zum Ausdruck kommt, woraus schließlich $\hat{c} = c (1 + \partial \hat{\alpha} / \partial x) > c$ folgt. Die unerwünschte Verlangsamung beim Eintritt bzw. Beschleunigung beim Austritt aus dem inneren, eingebetteten Gebiet läßt sich allerdings dann am geringsten halten, wenn man den Verlauf des Mischungskoeffizienten $\alpha(x)$ dergestalt wählt, daß dieser von der Randfläche aus gesehen möglichst rasch abfällt, so daß gleiches auch für dessen Ableitung $\partial \alpha / \partial x$ gilt. Derartige Anforderungen werden beispielsweise von den Exponentialfunktionen erfüllt.

4.8 Das Randverhalten von positiv definiten Wellen

Bis hierher ist bei der Betrachtung von Wellen jeglicher Art hinsichtlich ihres Verhaltens im Randbereich der Simulationsgebiete stillschweigend davon ausgegangen worden, daß positive wie negative Auslenkungen der Wellen aus einer willkürlich gewählten Null- oder Ruhelage gleichermaßen erlaubt sind und darüberhinaus auch völlig gleichberechtigt nebeneinander auftreten. Das ist allerdings in der Realität nicht immer der Fall. So sind beispielsweise die Wertebereiche sämtlicher thermodynamischer Variablen wie Dichte, Druck und Temperatur, aber auch der Stoffmenge durch eine feste Begrenzung nach unten hin beschränkt, so daß diese Größen keine negativen Werte annehmen können.

Werden gewöhnliche (z.B. mechanische oder elektromagnetische) Wellen an einem festen Rand zur Umkehr gezwungen, so ist dies mit einem Phasensprung um 180° bei der Reflexion verbunden. Die positive Auslenkung eines Wellenabschnittes kehrt sich nach dem Auftreffen auf den Rand um und verläuft fortan im negativen Bereich. Für den entgegengesetzten Fall mit anfänglich negativer Auslenkung gilt die konträre Aussage.

Sollte eine bestimmte Art Wellen hingegen eine solche Invertierung des Vorzeichens der betrachteten Größe nicht zulassen, dann ist die analytische Betrachtung in den vorhergehenden Abschnitten dementsprechend zu modifizieren. In diesem Fall ändert sich nämlich die Reflektivität R_i des *i*-ten Teilbereiches der Dämpfungsschicht. Wenn das betreffende Teilgebiet die Transmissivität T_i aufweist, dann gilt für derartige Wellen mit positiv definiter Auslenkung $R_i = 1 - T_i$ (im Gegensatz zu $R_i = -(1 - T_i) = T_i - 1$ bei gewöhnlichen Wellen). Dies hat auf die Matrixgleichungen (146)–(148) allerdings nur die eine Auswirkung, daß nämlich sämtliche Elemente des aus den Teilreflektivitäten an den einzelnen Schichten aufgebauten Vektors auf der rechten Seite jener Gleichungen ihr Vorzeichen umkehren (dies gilt auch für die Reflexion an der letzten Schicht, d.h. an der Randfläche selber; deren Teilreflektivität beträgt nun $+T_1^2 T_2^2 \cdots T_{d-1}^2$ anstelle des Inversen dieses Ausdruckes).

Folglich wirkt sich die Einschränkung der Funktionswerte auf den positiven Bereich nur auf das Vorzeichen der Gesamtreflektivität aus, nicht aber auf deren Betrag; im speziellen bleibt der optimale Verlauf der Mischungskoeffizienten α_i unangetastet, so daß sämtliche bisher erhaltenen Resultate auch auf diesen Wellentyp übertragen werden können.

5 Übertragung der Randbedingungen auf numerische Modelle

Die im vorangehenden Kapitel erlangten theoretischen Kenntnisse über das Verhalten von Wellen am offenen und genesteten Rand verlangen nun nach einer Verifizierung am numerischen Modell. Hierzu werden in diesem Kapitel zunächst die verwendeten Modelle, ein eindimensionales Flachwassermodell sowie das komplexe, dreidimensionale KAMM (Karlsruher Atmosphärisches Mesoskaliges Modell), vorgestellt und auf zu beachtende Besonderheiten in der Handhabung dieser beiden Modelle hingewiesen.

5.1 Ein eindimensionales Flachwassermodell

Reflexion von nach außen laufenden Störungen erfolgt dann am ehesten, wenn das zugrundeliegende Modell Wellenlösungen erlaubt. Deshalb ist es sinnvoll, als einfachstes Modell die eindimensionale Wellengleichung als Beispiel einer hyperbolischen Differentialgleichung zu betrachten:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{191}$$

In der Literatur werden zur Überprüfung von speziellen Randbedingungen häufig eindimensionale Flachwasserwellen eingesetzt [z.B. bei Durran et al. (1993), Kantha et al. (1990), Lehmann (1993)]. Deren Phasengeschwindigkeit ist höhenunabhängig und berechnet sich zu c = g H mit der Erdbeschleunigung $g \approx 9,81 \text{ m/s}^2$ und der Dicke der Atmosphärenschicht, innerhalb derer sich die Flachwasserwellen ausbilden, bzw. der Tiefe des Sees oder Meeres in der Ozeanographie. Das Vorkommen solcher dispersionsfreien langen Wellen beschränkt sich auf inkompressible Medien; zusätzlich wird die Gültigkeit der hydrostatischen Grundgleichung vorausgesetzt. In der Meteorologie treten die Flachwasserwellen deshalb vornehmlich im Zusammenhang mit der sogenannten *homogenen Atmosphäre* in Erscheinung.

Die zweiten Ableitungen nach der Zeit t und nach dem Ort x werden beide mittels zentrierter Differenzen berechnet:

$$\frac{f_i^{n-1} - 2f_i^n + f_i^{n+1}}{2\Delta t^2} = c^2 \frac{f_{i-1}^n - 2f_i^n + f_{i+1}^n}{2\Delta x^2}$$
(192)

Dabei bedeutet f_i^n den Funktionswert der Funktion f an der Stelle $x = x_0 + i\Delta x$ zum Zeitpunkt $t = n\Delta t$. In eine prognostische Form gebracht, lautet die Differenzengleichung

$$f_i^{n+1} = 2f_i^n - f_i^{n-1} + c^2 \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \left(f_{i-1}^n - 2f_i^n + f_{i+1}^n \right)$$
(193)

5.2 Der unterschiedliche Charakter von Differentialgleichungen

Allgemein werden drei Unterarten von Differentialgleichungen unterschieden: elliptische, parabolische und hyperbolische. Elliptische Differentialgleichungen wie z.B. die Poisson-Gleichung $\Delta f(\vec{x}) = g(\vec{x})$ weisen in der Regel nur räumliche Differentiale auf; ihre Lösungen sind unabhängig von der Zeitkoordinate und damit stationär. Damit erübrigt sich die Vorgabe von Anfangswerten. An festzulegenden Nebenbedingungen bleiben deshalb nur die Werte an den Rändern des Integrationsgebietes. Bedingt durch die Stationarität der Lösung handelt es sich bei diesem Gebiet gewöhnlich um ein begrenztes Volumen. Demnach liegt der klassische Fall eines *Randwertproblems* vor – mit vollständiger Spezifizierung aller Variablen auf dem gesamten Rand.

Bei parabolischen (z.B. $\partial f/\partial t = \Delta f$) und hyperbolischen (z.B. $\partial^2 f/\partial t^2 = \Delta f$) Differentialgleichungen tritt die zeitliche Komponente hinzu. Gemäß eines Anfangswertproblems sind Startwerte der auftretenden Unbekannten vorzugeben. Würde man zusätzlich am gesamten Rand des ausgewählten Integrationsgebietes die Werte sämtlicher Variablen vorgeben, so führte dies zum Auftreten einer *Überspezifizierung* der verwendeten Parameter im Randbereich. Bei einer numerischen Simulation treten dann aber Störungen in Form von Abweichungen der Eigenschaften der Differentialgleichung vom theoretisch zu erwartenden Verhalten auf.

Es dürfen also immer nur an Teilen des Randes unabhängige Werte der beteiligten Variablen vorgegeben werden. Möglich ist allerdings auch die Beschränkung der Anzahl der am Rand festgelegten Unbekannten selbst, so daß – z.B. in Abhängigkeit von den örtlichen Strömungsgegebenheiten – zwar einzelne Variablen am Rand vorgegeben werden, andere hingegen frei bleiben, um eine möglichst ungehinderte Dynamik der numerischen Simulation zu gewährleisten. Auf die Vorgabe von Randwerten kann allerdings nicht völlig verzichtet werden, wenn es beispielsweise darum geht, ein genestetes Gebiet einer makroskaligen Steuerung von außen zu unterwerfen. Um eine dahingehende Informationsübertragung zu ermöglichen, ist die Spezifizierung der betreffenden Variablen im *Einström*bereich des Nestrandes unabdinglich. Am Ausströmrand ist eine derartige, enge Kopplung hingegen nicht notwendig und ist vielmehr zur Vermeidung übermäßiger Störungen tunlichst zu unterlassen. Die Unterscheidung von Einström- und Ausströmrand bezieht sich dabei auf diejenigen Teilbereiche der Umrandung des Integrationsgebietes, an welchen zu einem bestimmten Zeitpunkt gerade ein Antrieb von außen erfolgt (im Falle des Einströmrandes) bzw. an denen eine von innen kommende Strömung anliegt (letzteres wird als Ausströmrand bezeichnet). Weder Einström- noch Ausströmrand sind also statische Gebilde; vielmehr kann ein bestimmter Abschnitt des Randes nacheinander, also zu verschiedenen Zeiten, von in beide Richtungen propagierenden Strömungsgebilden passiert werden. Im Idealfall (d.h. bei Annahme von ungehinderter gegenseitiger Durchdringung der sich kreuzenden Wellenpakete) wäre sogar eine gleichzeitige Funktion des Randes als Einström- wie als Ausströmrand denkbar. Die programmiertechnische Umsetzung eines solcher Falles wird sich aber wohl kaum zufriedenstellend realisieren lassen.

Ein Hauptmerkmal nicht vorsichtig genug durchgeführter Spezifizierung des Randes ist das Auftreten von unerwünschten Reflexionen. Auf die Berandung zulaufende Wellen sollten sich eigentlich so verhalten, als ob der – in der Regel künstliche – Rand nicht vorhanden wäre, und folglich im 'Moment des Auftreffens auf die Begrenzung verschwinden. Bedingt durch Unzulänglichkeiten in der numerischen Formulierung der Randbedingungen ist dies aber in der Praxis nicht der Fall, und es bleibt nach der Kollision mit dem Rand stets eine, bestenfalls erheblich gedämpfte Welle übrig, die nun wieder ins Innere des Integrationsgebietes zurückläuft und dort eventuell eine Untersuchung des prognostischen Verhaltens der Differentialgleichung behindert.

5.3 Das dreidimensionale meteorologische Modell KAMM

Im KAMM (Karlsruher Atmosphärisches Mesoskaliges Modell) werden die Topographie des Geländes und die Verteilung der Vegetationsarten als Parameter vorgegeben. In einigen Höhen werden zudem der Vektor des geostrophischen Windes und die dortige potentielle Temperatur als Eingabegrößen verwendet. Die prognostischen Variablen – die Windkomponenten, die Abweichung von der potentiellen Temperatur sowie die relative Feuchte und der Flüssigwassergehalt – unterliegen zeitlichen Änderungen. Beispielsweise paßt sich der Geschwindigkeitsvektor mit der Zeit der von außen vorgegebenen geostrophischen Geschwindigkeit an (unter Berücksichtigung der Ekmanschen Windspirale in der Grenzschicht), sofern die lokale Topographie nicht mehr oder weniger starke Abweichungen vom geostrophischen Zustand hervorruft.

Für eine ausführliche – auch formelmäßige – Beschreibung des KAMMs sei auf Adrian und Fiedler (1991) verwiesen.

5.3.1 Die Behandlung der Topographie im KAMM

Ein mesoskaliges Modell ist dadurch charakterisiert, daß nicht nur die horizontale Gitterweite kleiner als bei entsprechend großräumigeren Modellen gewählt wird, sondern auch der vertikale Abstand der Basisflächen geringer sein muß, um dynamische Strukturen im mesoskaligen Bereich auch hinreichend gut räumlich auflösen zu können. Vor allem bei Anwendung eines Erdbodenmodells können in den untersten, auf dem Boden aufliegenden Luftschichten erhebliche Gradienten der diversen meteorologischen Parameter auftreten, so daß dort ein dementsprechend geringer vertikaler Abstand der horizontalen Gitterflächen notwendig ist. Auf der anderen Seite können sich mesoskalige Phänomene in vertikaler Richtung über weite Teile der Troposphäre erstrecken. Außerhalb der turbulenten Grenzschicht sind die Variationen der meteorologischen Parameter mit der Höhe ungleich geringer, so daß eine durchgängig hohe vertikale Auflösung (z.B. im Meter-Bereich, wie sie in Erdbodennähe durchaus angebracht sein kann) aus Kapazitätsgründen nicht in Erwägung kommt. Als vorteilhaft erweist sich die Abkehr von mit der Höhe linear zusammenhängenden Vertikalkoordinaten (z-System, aber auch in erster Näherung p-System und Θ -System) und der Schritt hin zu Koordinaten mit vertikal veränderlichem Abstand der horizontalen Grundflächen. Im KAMM wird hierzu ein η -System eingeführt, das über die folgende Gleichung definiert ist:

$$\frac{c-1}{c+1}(1-\eta)^2 + \frac{2}{c+1}(1-\eta) = \frac{h(x,y)-z}{h(x,y)-H}$$
(194)

Dabei stellt z die gewöhnliche Vertikalkoordinate dar, h(x, y) ist die Orographiefunktion, und H bezeichnet die Obergrenze des definierten Gebietes (alles im z-System). Der Parameter c entspricht dem Verhältnis der vertikalen Gitterweiten am Ober- (z = H bzw. $\eta = 0$) und Unterrand (z = 0 bzw. $\eta = 1$) des Modellgebietes. Denn die Auflösung der Definitionsgleichung nach z und anschließende Ableitung nach η ergibt

$$z = h(x,y) + (H - h(x,y)) \left(\frac{c-1}{c+1} (1-\eta)^2 + \frac{2}{c+1} (1-\eta)\right)$$
(195)

$$\frac{\partial z}{\partial \eta} = \left(H - h(x, y)\right) \left(-2\frac{c-1}{c+1}\left(1 - \eta\right) - \frac{2}{c+1}\right) \tag{196}$$

$$\frac{\partial z/\partial \eta|_{\eta=0}}{\partial z/\partial \eta|_{\eta=1}} = \frac{-2\left(c-1\right)\left(1-0\right)-2}{-2\left(c-1\right)\left(1-1\right)-2} = \frac{-2\left(c-1\right)-2}{-2} = c$$
(197)

Bei der Nestung von Gebieten mit unterschiedlicher Gitterpunktdichte stellt sich auch das Problem, wie mit der Topographie an den gemeinsamen Punkten beider Gitternetze verfahren werden soll. Die Höhenschichtung des gröberen Gebietes ist dabei in geeigneter Weise auf das dichtere Netz des genesteten Gebietes abzubilden. Dazu böte sich wiederum eine Form der Interpolation an. Unter Umständen kann es darüberhinaus vorteilhaft sein, zusätzlich im Randbereich des Nestes, in dem die Anpassung an das äußere Gebiet stattfindet, im feineren Gebiet gleichermaßen die gröbere Topographie zu verwenden. Dadurch läßt sich der Übergang
der von außen kommenden Signale glätten, was allgemein der geforderten Konsistenz der Nestungsbedingung entgegenkommt.

5.3.2 Randbedingungen der Geschwindigkeitskomponenten

Bei Annahme von *flacher Konvektion* im Rahmen der sogenannten Boussinesq-Approximation können der Druck p, die Dichte ρ und die Temperatur T innerhalb der betrachteten bodennahen Schicht näherungsweise als konstant, d.h. höhenunabhängig angesehen werden. Man spricht deshalb auch von einer *anelastischen Approximation*. Als Konsequenz daraus vereinfacht sich die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\varrho \, \vec{v}) \tag{198}$$

wegen $\rho \approx \text{const. zu } \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$. Das der flachen Konvektion zugrundeliegende Strömungsfeld ist also divergenzfrei. Dies wird im KAMM bei der Berechnung des Stördruckes bzw. der Abweichung der Exner-Funktion vom Grundzustand verwendet. Sollte im Randbereich die Divergenzfreiheit des Strömungsfeldes nicht mehr streng erfüllt sein, so führt dies zu Fehlern hinsichtlich des diagnostisch berechneten Stördruckes. Die Randbedingungen sollten also so gewählt werden, daß die Bedingung der Divergenzfreiheit der Strömung möglichst wenig oder am besten überhaupt nicht beeinflußt wird.

Reine Extrapolationsbedingungen stellen dabei kein Problem dar, sofern davon ausgegangen werden kann, daß zu Beginn im Anfangszustand der Strömung bereits Divergenzfreiheit vorliegt. Extrapoliert man sämtliche drei Geschwindigkeitskomponenten rein zeitlich oder rein räumlich, so überträgt sich die Divergenzfreiheit des vorherigen Zustands bzw. des benachbarten, weiter innen gelegenen Bereichs auf den neuen Zustand nach der Extrapolation. Dies ist sofort einsichtig bei rein räumlicher Extrapolation, also der Besetzung der Randpunkte mit den Funktionswerten der Nachbarpunkte einen Schritt weiter innen; am Rand verschwinden dann die Ableitungen in sämtlichen Raumrichtungen, und die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes wird automatisch stets Null. Sinngemäß gilt dies auch für eine Kombination aus teils räumlicher und teils zeitlicher Extrapolation mit unveränderlichen Gewichtungskoeffizienten, also einer Advektion der Strömungseigenschaften mit konstanter Geschwindigkeit. Auf die Ausstrahlungsbedingungen, die ja nichts anderes als eine Extrapolation mit variablen, vom aktuellen Strömungszustand abhängigen Koeffizienten darstellen, läßt sich dies zunächst nicht ohne weiteres übertragen, weil an benachbarten Randpunkten verschiedene Phasengeschwindigkeiten der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten auftreten können, die zu unterschiedlichen Uberlagerungen von Funktionswerten führen und damit eine Verzerrung oder Deformation des Strömungsfeldes im Randbereich verursachen. Bei genauerer Betrachtung ist aber festzustellen, daß die Herausbildung derartiger Inhomogenitäten hinsichtlich der Phasengeschwindigkeit ein Auftreten von Divergenz nach sich zieht und deshalb gegen die Grundannahme der Divergenzfreiheit verstößt, also normalerweise nicht eintreten sollte. Demnach laufen auch Ausstrahlungsbedingungen der Inkompressibilität der Strömung nicht zuwider.

Anders sieht der Sachverhalt bei Vorhandensein von Dämpfungsschichten endlicher Breite aus. Hier soll der Einfachheit halber nur der Fall Newtonscher Dämpfung (bzw. Anpassung bei der Nestung) betrachtet werden:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \dots + k \, \vec{v} \tag{199}$$

Bei konstantem Koeffizienten k in der Dämpfungsschicht bleibt die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes erhalten, denn es gilt

$$\vec{\nabla} \cdot (k\,\vec{v}) = k\,\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \tag{200}$$

Ein innerhalb der Dämpfungsschicht veränderlicher Koeffizient k bzw. der Übergang vom durch die Spezifizierung des Randes unbeeinflußten Inneren in die Dämpfungszone stört allerdings die Divergenz. Allgemein gilt nämlich – bei Verlauf der x-Koordinate senkrecht zur Grenzfläche –

$$\vec{\nabla} \left(k \, \vec{v} \right) = k \, \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \, k = u \, \frac{\partial k}{\partial x} \neq 0 \tag{201}$$

Abweichungen von $\vec{\nabla} \cdot (k \vec{v}) = 0$ ergeben sich also bei großen Gradienten des Dämpfungskoeffizienten k in Verbindung mit einer Komponente des Windes normal zur Randfläche.

5.3.3 Druckrandbedingungen

Im KAMM wird der Stördruck, d.h. vielmehr die entsprechende Abweichung der Exner-Funktion vom Grundzustand, im Gegensatz beispielsweise zur Temperaturabweichung *diagnostisch* berechnet. Dies liegt darin begründet, daß wegen der vorausgesetzten flachen Konvektion das Strömungsfeld divergenzfrei wird. Um Besagtes zu zeigen, geht man zunächst von der Bewegungsgleichung in ihrer ursprünglichen Form aus:

$$\frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t} = -c_p \,\Theta \,\vec{\nabla}(\pi - \pi_g) - \underbrace{f \,\vec{k} \times (\vec{v} - \vec{v}_g)}_{\vec{C}} - \vec{R} \tag{202}$$

Dabei soll \vec{R} sämtliche reibungsbedingten Beschleunigungsterme enthalten, also insbesondere auch die turbulenten Vorgänge beschreiben. Der Coriolisterm wird

mit $\vec{C} = f \vec{k} \times (\vec{v} - \vec{v}_g)$ abgekürzt. Wird auf die Gleichung (202) der Divergenzoperator $\vec{\nabla} \cdot \ldots$ angewandt, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Divergenzfreiheit $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ des Strömungsfeldes

$$\vec{\nabla} \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t} = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}\right) = \frac{\partial \vec{\nabla} \cdot \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) = -\vec{\nabla} \cdot [c_p \Theta \vec{\nabla} (\pi - \pi_g) - \vec{C} - \vec{R}]$$
(203)

Die Abweichung der Exner-Funktion π vom Mittelwert π_g läßt sich in eine dynamisch sowie eine thermisch bedingte Komponente gemäß $\pi - \pi_g = \pi'_d + \pi'_h$ aufteilen. Für den dynamischen Teil des Druckgradientterm gilt demnach

$$\vec{\nabla} \cdot (c_p \Theta \vec{\nabla} \pi'_d) = \vec{\nabla} \cdot (-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} - \underbrace{c_p \Theta \vec{\nabla} \pi'_h}_{\vec{P}_h} - \vec{C} - \vec{R})$$
(204)

Das Druckfeld muß also aus einer modifizierten Poisson-Gleichung ermittelt werden. Diese diagnostische Druckgleichung muß am seitlichen Rand des Modellgebietes einer Neumann-Randbedingung genügen:

$$c_p \Theta \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \pi'_d = \vec{n} \cdot (-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} - \vec{P}_h - \vec{C} - \vec{R})$$
(205)

5.4 Spezielle Probleme zweidimensionaler Simulationsgebiete

Bisher wurden die Randbedingungen ausschließlich im Hinblick auf ein eindimensionales Problem betrachtet. Bei der Übertragung der Ergebnisse auf ein Modell mit einer in zwei Raumrichtungen aufgespannten Grundfläche ist stillschweigend davon ausgegangen worden, daß parallel zur Randfläche eine gewisse Homogenität der Strömung besteht und deshalb die eindimensionalen Randbedingungen – mit nunmehr der Normalkomponenten der Randfläche als einziger Abhängigkeit – unverändert übernommen werden können. Anders ausgedrückt, es wird davon ausgegangen, daß der Wind im Randbereich in eine senkrecht zur Randfläche und eine parallel dazu verlaufende Komponente zerlegt werden kann, die unabhängig voneinander den Randbedingungen unterworfen sind. Die Windkomponente parallel zum Rand sorgt dabei für eine seitliche Verschiebung der Strömungskonfiguration. Herrscht den gesamten Rand entlang dieselbe Methode der Dämpfung des auslaufenden Wellenpaketes bzw. der Anpassung der einlaufenden Welle, so sollte sich im Vergleich zu demselben Problem bei rein senkrechtem Einfall auf die Grenzfläche kein Unterschied ergeben. Dies ist bei realen Randbedingungen selbstverständlich nur in erster Näherung gültig.

Bei der Ubertragung der eindimensionalen Randbedingungen auf den Fall eines Simulationsgebietes mit zweidimensionaler Grundfläche stellt sich zunächst einmal ein programmiertechnisches Problem. Man möchte die eindimensionalen Formulierungen möglichst ohne größeren Aufwand übernehmen und darüberhinaus nicht für jede Seitenfläche eigene Randbedingungen aufstellen. Dieses Problem läßt sich dadurch beheben, daß ein neues, eindimensionales Feld definiert wird, in dem die "Adressen"¹² der jeweils zueinander äquivalenten Gitterpunkte gespeichert sind. Mit "äquivalent" sind hier beispielsweise sämtliche Gitterpunkte an den vier Seitenflächen gemeint, die vom Rand aus gesehen zwei Schritte weiter innen liegen. Soll nun während des Programmablaufes beispielsweise der dem Randpunkt benachbarte, also einen Schritt weiter innen liegende Punkt angesprochen, also dessen Funktionswert eingelesen oder geändert werden, so lassen sich über die Schnittstelle des eben eingeführten Hilfsfeldes, das die räumliche Gestalt des Modellgebietes auf ein eindimensionales Objekt abbildet, zugleich sämtliche derartige Gitterpunkte ansprechen, auf welche die Bedingung "einen Schritt vom Randpunkt entfernt" zutrifft.

Die Bedingung einfacher räumlicher Extrapolation, die in eindimensionaler Form $f_b^{n+1} := f_{b-1}^{n+1}$ lautet, läßt sich bei einem mehrdimensionalen Simulationsgebiet gemäß $f_{h(1,i)}^{n+1} := f_{h(2,i)}^{n+1}$ schreiben. Dabei steht h für das zusätzlich eingeführte Hilfsfeld, welches die Adressen der einander gleichwertigen Gitterpunkte enthält. Die Zählvariable i läuft von eins bis zur Anzahl der jeweils äquivalenten Gitterpunkte; dieser Wert entspricht maximal dem Umfang des rechteckigen Randes, kann allerdings auch etwas geringer sein, wie noch zu sehen sein wird.

5.5 Probleme an den Ecken rechtwinkliger Simulationsgebiete

Wenn die Randbedingungen in Form von eindimensionalen Gleichungen senkrecht zur jeweiligen Grenzfläche formuliert sind, kann es an den Ecken des Gebietes zu Problemen kommen, weil dort Randbedingungen in zwei horizontalen Raumrichtungen zur Durchführung gelangen und dabei in der Überlagerung entweder die Dämpfung verstärken oder aber auch vermindern können. Bedingt durch eine übermäßige Dämpfung kann nämlich auch das Gegenteil dessen erreicht werden, was ursprünglich beabsichtigt war – bis hin zu einer Verstärkung der Welle, eventuell mit umgekehrtem Vorzeichen, sofern die betreffende Quantität sowohl positive als auch negative Werte annehmen kann. Daß die Dämpfung durch diese zweifache Anwendung der Randbedingungen zweier Raumrichtungen im Bereich

¹²Da in FORTRAN die Elemente eines Feldes stets in einer definierten Reihenfolge abgespeichert sind, nämlich derart, daß der erste Laufindex in der Permutationsreihenfolge der Einerstelle entspricht und damit am schnellsten durchlaufen wird, läßt sich eine "relative Adresse" eines Gitterelementes in bezug auf den Koordinatenursprung in Form der Verschiebung des betreffenden Elementes im Speicher angeben.

der Ecken des Gebietes eher noch verbessert, also in der gewünschten Hinsicht positiv beeinflußt wird, darauf wird man sich wohl kaum verlassen wollen. Es ist aus diesem Grund besser, im Bereich der Ecken jeweils den Randbedingungen entlang einer angrenzenden Seite den Vorzug zu geben. Auf diese Weise entsteht zwar eine gewisse Asymmetrie bei der Behandlung der Ränder. Eine möglicherweise zu befürchtende Überkompensierung der erwarteten Effekte wird dadurch allerdings nachhaltig unterbunden.

Die größte Asymmetrie unter den hier betrachteten Rand- bzw. Nestungsbedingungen treten bei Anwendung einer breiten Dämpfungs- bzw. Anpassungsschicht von beispielsweise zehn Schrittweiten Umfang auf. Von den zwei über Eck aneinander angrenzenden Seitenflächen erfolgt in diesem Fall bei der einen davon Dämpfung in kontinuierlicher Weise bis zu der Ecke, wohingegen von der anderen Seitenfläche herkommend eine gleichmäßige Dämpfung von auf diese Fläche zulaufenden Wellen nur bis zu einer Entfernung von zehn Gitterpunkten von der Ecke erfolgt. Näher zur Ecke hin übernimmt dann die über Eck liegende, angrenzende Seite die Dämpfung der Welle. Dort werden aber nur diejenigen Wellen berücksichtigt, die senkrecht zu der dortigen Randfläche verlaufen. Es ist also ein – zwar schmaler – Bereich auf der einen Seite der Ecke vorhanden, entlang welchem senkrecht dazu einfallende Wellen nicht in korrekter Weise vom Modell mit den beschriebenen Randbedingungen verarbeitet werden können. Dieser Bereich ist aber in der Regel nur im Rahmen einer Dämpfungs- bzw. Anpassungsschicht bedeutend, bei der die Dämpfung bzw. Anpassung jedoch keine bestimmte Richtung – im Gegensatz z.B. zu den Ausstrahlungsbedingungen – bevorzugt. Im Klartext ist diese Aufteilung des Bereiches der Ecken auf die angrenzenden Seitenflächen der Newtonschen Dämpfung bzw. Anpassung völlig egal.

Ein zeitlicher Wechsel der Zugehörigkeit des Gebietes um die Ecke zu den beiden angrenzenden Seitenflächen – z.B. nach jedem Zeitschritt – ist programmiertechnisch nur schwer zu bewerkstelligen, weil mit großem Aufwand verbunden, und kann darüberhinaus zu Inkonsistenzen im Eckbereich führen, wenn die randbedingten Änderungen der prognostischen Variablen in aufeinander folgenden Zeitschritten derart großen Variationen ausgesetzt sind, daß das Courantsche Stabilitätskriterium nicht mehr eingehalten werden kann.

Die beschriebene Vorgehensweise führt bei der Nestung zudem dazu, daß von außen diagonal auf die Ecken des rechtwinkligen inneren Gebietes zulaufende Wellen unter einem "toten Winkel" einfallen, sprich: von der Grenzfläche unter den gegebenen Umständen nicht registriert und damit selbstverständlich auch nicht korrekt behandelt werden.

Einen Kompromiß zwischen der Forderung nach einer weitestgehend realistischen Darstellung der Strömung auch im Randbereich bei gleichzeitiger Beachtung der einfachen Umsetzbarkeit in einen Programmalgorithmus stellt schließlich die Variante dar, in der Umgebung der Ecken jeweils die Randspezifizierungen beider angrenzender Seitenflächen gleichberechtigt anzuwenden. Auf diese Weise wird eine etwaige Asymmetrie bei der Wellenpassage im Bereich der Ecken von vorneherein unterbunden. Bei Anwendung einer Ausstrahlungsrandbedingung ergibt sich als positiver Nebeneffekt, daß die in Wirklichkeit zweidimensionale Advektionsgleichung $\partial f/\partial t = -\vec{c} \cdot \vec{\nabla} f$ in korrekter Form als Summe ihrer beiden eindimensionalen Bestandteile dargestellt wird:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{c} \cdot \vec{\nabla} f = -c_x \frac{\partial f}{\partial x} - c_y \frac{\partial f}{\partial y}$$
(206)

Mithilfe einer Zwischenschrittmethode läßt sich diese Differentialgleichung in zwei sukzessive abzuarbeitende Differenzengleichungen umsetzen:

$$f' = f - \Delta t c_x \frac{\partial f}{\partial x}$$
(207)

$$f'' = f' - \Delta t \, c_y \, \frac{\partial f}{\partial y} \tag{208}$$

Das Zeitdifferential wurde dabei – wie üblich – entsprechend $\partial f/\partial t \approx [f(t+\Delta t) - f(t)]/\Delta t$ durch eine einseitige Differenz angenähert. Werden die beiden Gleichungen (207) und (208) addiert, so erhält man wiederum eine Differenzengleichung, die – in die dazugehörige Differentialform gebracht – gerade der Ausgangsgleichung (206) entspricht:

$$\frac{f''-f}{\Delta t} = -c_x \frac{\partial f}{\partial x} - c_y \frac{\partial f}{\partial y}$$
(209)

Erfolgt im Rahmen der Extrapolation bzw. Nestung durch schlichtes Uberschreiben lediglich die Spezifizierung der Randpunkte selber, so stellen sich selbstverständlich keinerlei derartigen Probleme im Bereich der Eckpunkte. Anders sieht dies allerdings bei der Verwendung einer Dämpfungs- bzw. Mischungsschicht aus. Braucht dem wesentlich unkomplizierteren Einströmrand dabei aus den bekannten Gründen weniger Beachtung geschenkt zu werden, so erscheint der Ausströmrand demgegenüber etwas problematischer. Wird nämlich die Linearkombination $f_i := (1 - \alpha_i) f_i + \alpha_i \tilde{f}_i$ an einem Punkt nahe einer Ecke gleich zweimal hintereinander durchgeführt (diese doppelte Anwendung ergibt sich gerade als Konsequenz daraus, daß keine der beiden angrenzenden Seitenflächen bevorzugt wird), so wirkt – wie die folgende Rechnung zeigt – die Schicht selber zwar weiterhin dämpfend bzw. die Werte beider Gitternetze miteinander kombinierend; allerdings erfahren die Mischungskoeffizienten dabei eine Veränderung.

$$f_i' = f_i + \alpha_i \left(\tilde{f}_i - f_i \right)$$

$$\begin{aligned}
f_{i}'' &= f_{i}' + \alpha_{i} \left(\tilde{f}_{i} - f_{i}' \right) \\
&= f_{i} + \alpha_{i} \left(\tilde{f}_{i} - f_{i} \right) + \alpha_{i} \left[\tilde{f}_{i} - f_{i} - \alpha_{i} \left(\tilde{f}_{i} - f_{i} \right) \right] \\
&= f_{i} + 2 \alpha_{i} \left(\tilde{f}_{i} - f \right) - \alpha_{i}^{2} \left(\tilde{f}_{i} - f_{i} \right) \\
&= f_{i} + \left(2 \alpha_{i} - \alpha_{i}^{2} \right) \left(\tilde{f}_{i} - f_{i} \right) = f_{i} + \alpha_{i}' \left(\tilde{f}_{i} - f_{i} \right)
\end{aligned}$$
(210)

Der neue Mischungskoeffizient lautet somit $\alpha'_i = 2 \alpha_i - \alpha_i^2 = \alpha_i (2 - \alpha_i)$. Weil die obige Linearkombination sogar eine Konvexkombination darstellt, gilt $0 \leq \alpha_i \leq 1$, und es lassen sich deshalb die beiden Grenzfälle $\alpha_i \approx 0$ bzw. $\alpha_i \approx 1$ untersuchen. Für $\alpha_i \approx 0$ geht das Verhältnis der beiden Summanden $2 \alpha_i / \alpha_i^2 = 2/\alpha_i \to \infty$, und es resultiert der gegenüber dem eindimensionalen Fall verdoppelte Mischungskoeffizient $\alpha'_i \approx 2 \alpha_i$. Im Falle $\alpha_i \approx 1$ strebt der Quotient aus den Summanden gegen den festen Wert $2/\alpha_i \approx 2$, so daß sich näherungsweise derselbe Koeffizient $\alpha'_i \approx 2 \alpha_i - \alpha_i = \alpha_i$ wie zuvor ergibt.

6 Programmdokumentation

Das meteorologische Modell KAMM ist in der Programmiersprache FORTRAN realisiert. Normalerweise dient es lediglich der Simulation abgeschlossener, also voneinander unabhängiger Gebiete. Um die Einrichtung von genesteten Gebieten zu ermöglichen, bedarf es deshalb einer geringfügigen Ergänzung des Hauptprogrammes sowie einiger zusätzlicher Unterprogramme. In diesem Kapitel folgt ein mit Erläuterungen versehener Abdruck der Modifizierungen des Programmtextes.

6.1 Anpassungen im Hauptprogramm haupt2.f

Die prognostischen Variablen u, v (horizontale Geschwindigkeit), w (Vertikalgeschwindigkeit), ts (Temperaturabweichung), qd (Dampfdruck) und qc (Flüssigwassergehalt) liegen zunächst als dreidimensionale Felder (ix, iy, iz) vor. Die Indizes ix, iy und iz bestimmen die Größe des Simulationsgebietes (Anzahl der Gitterpunkte). Für die spätere Formulierung der Randbedingungen erweist sich allerdings eine äquivalente, eindimensionale Formulierung dieser Felder als hilfreich. Die Speicherung von Feldern in linearer Anordnung durch FORTRAN erlaubt ein solches Vorgehen (bei mehrdimensionalen Feldern läuft dabei der erste Index am schnellsten).

Da die Felder nun allerdings nicht mehr in dreidimensionaler Form vorliegen und demnach auch nicht mehr über gewöhnliche (x,y,z)-Koordinaten angesprochen werden können, muß eine neue Koordinate eingeführt werden, welche entlang den Rändern des Gebietes verläuft. Die seitlichen Ränder umfassen insgesamt 2*(ix+iy)*iz Gitterpunkte (wobei die Eckpunkte aus Kontinuitätsgründen doppelt gezählt sind); dies stellt gleichzeitig den größtmöglichen Wert der neu eingeführten Variablen dar, die also nichts anderes macht, als sämtliche Punkte auf den Randflächen hintereinander aufzureihen. (Die Belegung der nachfolgenden Werte geschieht im Unterprogramm einricht und wird dort näher erläutert.)

```
integer aussen(2*(ix+iy)*iz,8),innen(4,2*(ix+iy)*iz,8)
double precision gewicht(4,2*(ix+iy)*iz,8)
```

Die für die Einrichtung autonomer Gebiete im Zuge der Nestung notwendige Parallelisierung erfolgt über den Standard MPI¹³ ("*M*essage *P*assing *I*nterface"). Zu Beginn wird eine Initialisierungsroutine **ipar** durchlaufen, in der die Aufgabelung in voneinander unabhängige Prozesse erfolgt:

call ipar(rank,size)

¹³Eine vollständige Beschreibung dieses Standards sowie diverse Handbücher sind unter http://www.mcs.anl.gov/mpi zu finden.

Als Rückgabe liefert dieses Unterprogramm zum einen die Gesamtzahl size der verfügbaren Prozesse und – als wichtige Größe zur Unterscheidung der Prozesse untereinander – die Rangordnungsnummer rank des jeweiligen Prozesses. Dabei gilt $0 \leq \text{rank} < \text{size}$.

```
subroutine ipar(rank,size)
include 'mpif.h'
integer rank,size,ierror
call mpi_init(ierror)
call mpi_comm_size(mpi_comm_world,size,ierror)
call mpi_comm_rank(mpi_comm_world,rank,ierror)
return
end
```

Nach Beendigung des Hauptprogrammes muß ein entsprechendes Unterprogramm epar aufgerufen werden, welches dafür sorgt, daß die parallel zueinander verlaufenden Prozesse wieder zu einem Hauptast zusammengeführt und sämtliche, vom MPI vorgenommenen Einstellungen wieder rückgängig gemacht werden. Das System wird also in dem Zustand hinterlassen, wie es vor der Parallelisierung vorgefunden wurde:

call epar()

Das Unterprogramm **epar** wartet zunächst, bis sämtliche Prozesse an einer – aus Sicherheitsgründen eingefügten – Schranke angekommen sind und ruft anschließend die Beendigungsroutine des MPI auf. Wäre die Schranke nicht vorhanden, so könnte der Verlauf des Programmes dadurch beeinträchtigt werden, daß eine eventuell unter Beteiligung des nun zu zerstörenden Prozesses stattfindende Kommunikation noch nicht vollständig beendet ist.

```
subroutine epar()
include 'mpif.h'
integer ierror
call mpi_barrier(mpi_comm_world,ierror)
call mpi_finalize(ierror)
```

return end

Nach erfolgter Aufgabelung des Programmes in zwei (oder auch mehr) parallel verlaufende Prozesse und zusätzlichen, für jeden derartigen Prozeß (d.h. jedes der genesteten Gebiete) separat durchzuführenden Initialisierungen wird das Unterprogramm einricht aufgerufen, welches die oben eingeführten Hilfsfelder mit (im weiteren Programmablauf konstanten) Werten vorbelegt:

call einricht(i0,j0,ix,iy,iz,aussen,innen,gewicht,dx,dy,rank,size)

Bei den Argumenten tritt neben der Gesamtzahl der parallel verlaufenden Prozesse size auch die Rangnummer rank des gerade aktiven, das Unterprogramm aufrufenden Prozesses auf. Jeder Prozeß repräsentiert ein eigenständiges Gebiet, auf dem zunächst unabhängig voneinander getrennte Simulationsmodelle (freilich denselben physikalischen Gesetzmäßigkeiten unterliegend) ablaufen. Das später innerhalb der Zeitschleife aufzurufende Unterprogramm rand bewerkstelligt die alleinige Kommunikation der Prozesse und damit der Gebiete untereinander. Damit im weiteren Verlauf die Rand- bzw. Nestungsbedingungen in der gewünschten Form festgelegt werden können, muß am Anfang die konkrete Lage der verschiedenen Gebiete zueinander angegeben werden. Bei der Nestung in ihrer üblichen Form liegen die eingebetteten Gebiete mit höherer Rangnummer rank+1 und bedingt durch einen geringeren horizontalen Abstand dx und dy der Gitterpunkte – besserer räumlicher Auflösung vollständig innerhalb der sie aufnehmenden Gebiete mit der Ordnungsnummer rank. Die in der Argumentenliste des Unterprogramms einricht auftretenden Parameter i0 und j0 legen diesbezüglich den Ursprung des jeweils nachfolgenden Gebietes (mit der Nummer rank+1) in gewöhnlichen (x,y)-Koordinaten fest.

Die eigentliche Behandlung der Ränder und Grenzflächen der miteinander gekoppelten Gebiete erfolgt innerhalb der Zeitschleife des prognostischen Modells (beim Sprung von einem Zeitschritt zum nächsten) im Rahmen des Unterprogramms rand. Der Aufruf des Unterprogrammes rand erfolgt für die einzelnen prognostischen Größen separat:

```
& ausstroem,einstroem,zweiwege)
call rand(qd,qdn,ix,iy,iz,rank,size,aussen,innen,gewicht,
& ausstroem,einstroem,zweiwege)
call rand(qc,qcn,ix,iy,iz,rank,size,aussen,innen,gewicht,
& ausstroem,einstroem,zweiwege)
```

Die in der Argumentenliste auftretenden integer-Parameter ausstroem und einstroem dienen der Festlegung der jeweils am Ausström- bzw. Einströmrand anzuwendenden Rand- bzw. Nestungsbedingungen. Dabei können integer-Werte gemäß Tabelle 8 eingesetzt werden.

Wert	Verfahren am genesteten bzw. offenen Rand
0	keine Nestung bzw. Randspezifizierung
1	Übertragung des Randwertes bzw. Extrapolation
2	Ein- bzw. Ausstrahlungsbedingung
3	Konstante Anpassungs- bzw. Dämpfungsschicht
4	Strömungsabhängige Anpassungs- bzw. Dämpfungsschicht

Tabelle 8: Auswahlmöglichkeit im Programmablauf

Der logical-Schalter zweiwege (.true. oder .false.) am Schluß der Argumentenliste erlaubt desweiteren die Hinzuschaltung einer "Zweiwege-Nestung", bei der in Erweiterung des üblichen Vorgehens nicht nur ein Antrieb des genesteten Gebietes durch das äußere Gebiet, in das es eingebettet ist, erfolgt, sondern darüberhinaus auch ein Informationsaustausch in entgegengesetzter Richtung, also vom feineren zum gröberen Gebiet, zugelassen wird, mithin also eine (mehr oder weniger die Realität widerspiegelnde) gegenseitige Wechselwirkung der beiden Gebiete besteht.

6.2 Das Unterprogramm einricht

Im Unterprogramm einricht erfolgt die Vorbelegung der für den späteren Gebrauch bei der Behandlung der Randbedingungen benötigten eindimensionalen Adressenfelder aussen und innen sowie eines zusätzlichen, eng mit dem Feld innen verbundenen Feldes gewicht, welches – wie im nachfolgenden noch genauer erläutert wird – eine Gewichtung der Werte an den durch innen vorgegebenen Adressen erlaubt.

```
include 'mpif.h'
integer i0,j0,ix,iy,iz,aussen(2*(ix+iy)*iz,8),
& innen(4,2*(ix+iy)*iz,8),rank,size,h,i,j,k,n,
& status(mpi_status_size),ierror
double precision gewicht(4,2*(ix+iy)*iz,8),dx,dy,xhilf,yhilf,
& xverh,yverh
```

Das Adreßfeld **aussen** beinhaltet in einer eindimensionalen Anordnung die Adressen sämtlicher Randpunkte an Seitenflächen des betreffenden Gebietes. Unter "Adresse" soll in diesem Zusammenhang der Abstand eines bestimmten Gitterpunktes in der Speicheranordnung im eigentlichen, dreidimensionalen Datenfeld gegenüber einem willkürlich gesetzten Ursprung verstanden werden. Als Ursprung wird im folgenden stets der unterste, südwestlichste Punkt des Gebietes (mit den kartesischen Koordinaten x=y=z=0) gewählt. Man macht sich dabei die Tatsache zunutze, daß mehrdimensionale Felder in FORTRAN genauso wie eindimensionale Felder behandelt werden. Die Elemente werden nämlich derart hintereinander angeordnet, daß der erste, am weitesten links stehende Index, bei der linearen Verkettung am schnellsten läuft und die weiter rechts stehenden Indizes entsprechend langsamer anwachsen. Ein Index kann dabei erst dann erhöht werden, wenn sein Vorgänger den gesamten, ihm zustehenden Wertebereich durchlaufen hat (Man beachte die Analogie zum Prinzip des Übertrags bei Zahlensystemen). Wenn ix, iy und iz die Ausmaße des Gebietes in den drei Raumrichtungen darstellen, ergibt sich demnach eine Größe des eindimensionalen Feldes von ix*iy*iz Einheiten; die maximale Verschiebung vom Ursprung (0,0,0) aus zum obersten Punkt am nordöstlichsten Rand des Gebietes (ix, iy, iz) beträgt folglich (in derselben Einheit) ix*iy*iz-1. Um hinsichtlich der späteren Anwendung verschiedener Rand- bzw. Nestungsbedingungen flexibel zu sein, muß nicht nur jeder Punkt auf den Randflächen selbst mithilfe des eindimensionalen Feldes aussen direkt ansprechbar sein, gleiches soll vielmehr auch für eine Reihe dem Rand benachbarter Punkte weiter innen im Gebiet gelten. Die in der Literatur zitierten Rand- bzw. Nestungsbedingungen (Dämpfungs- bzw. Mischungsschicht) benötigen vom Rand aus gesehen maximal acht benachbarte Punkte, so daß dieser Wert auch hier als Beschränkung übernommen wird. Es darf nämlich nicht außer acht gelassen werden, daß jede derartige, zur Randfläche parallele Schicht zwecks der direkten Benutzung der betreffenden Gitterpunkte auch zusätzlichen Speicherplatz benötigt, um deren sämtliche "Adressen", d.h. in diesem Fall Elementverschiebungen aufzunehmen. Aus Gründen, die später bei der eigentlichen Behandlung der Ränder näher erläutert werden, soll jede dieser parallelen, in einem bestimmten Abstand zum Rand stehenden Fläche gleich groß sein. Es handelt sich dabei also nicht um eine Ineinanderschachtelung vollkommen kongruenter Gebilde (hier: Seitliche Mantelflächen eines Quaders), die sich zur Raummitte hin verjüngen, sondern um eine Parallelverschiebung der Randflächen nach innen – unter Beibehaltung ihrer Längenerstreckung. Die Betrachtung des Zeichens "#" mag diesen Vorgang anschaulich werden lassen – darüberhinaus liefert Abbildung 6 einen Vergleich zwischen den beiden verschiedenen Anordnungen.



Abbildung 6: Zugehörigkeit zum Adreßfeld aussen im Bereich der Ecken

Ein späteres Auftreten des Feldes **aussen** z.B. in der Form **f**(**aussen**(**n**,2)) bewirkt dann, daß das (dreidimensionale) Feld **f** am zweit-äußersten Punkt (deshalb der rechte Index "2"), also dem zum Randpunkt direkt benachbarten Punkt, angesprochen wird. An welcher Stelle der Randfläche genau der Punkt mit der internen Ordnungszahl **n** liegt, spielt dabei keine Rolle. Diese Reihenfolge kann grundsätzlich beliebig organisiert sein – im folgenden wird z.B. eine Umrundung des Gebietes entgegen dem Uhrzeiger, also im mathematisch positiven Umlaufsinn, angewandt. Wichtig dabei ist allerdings, daß eine irgendwie geartete, auf einen Punkt in einem bestimmten Abstand vom Rand aus anzuwendende Operation stets für *alle* Punkte mit dieser Eigenschaft durchgeführt wird. Dies erreicht man dadurch, daß der linke Index **n** bei jeder Aktion den gesamten Wertebereich von 1 bis 2*(ix+iy)*iz durchläuft. (Letzteres entspricht gerade der Gesamtzahl der Randpunkte auf Seitenflächen.)

Da die einzelnen Gebiete ineinander verschachtelt sind – der Ursprung des jeweils nachfolgenden, eingebetteten Gebietes liegt bekanntlich beim Punkt mit den kartesischen Koordinaten (i0,j0) –, sind die Randpunkte eines genesteten Gebietes natürlich gleichzeitig auch innere Punkte des nächstgrößeren Gebietes. Um die gegenseitige Übertragung von Informationen an dieser Grenzfläche der beiden Gebiete zu ermöglichen, wird (sozusagen als Pendant zum Feld **aussen**) ein weiteres eindimensionales Feld **innen** definiert, welches grundsätzlich in analoger Weise mit "Adressen" aufgefüllt wird wie das bereits bekannte Feld **aussen**. Weil im größeren Gebiet allerdings die Gitterpunkte weniger dicht beieinander liegen, ist eine direkte Entsprechung von Randpunkten des eingebetteten Gebietes (über das Feld aussen) und an derselben Stelle liegenden inneren Punkten des größeren Gebietes (über das Feld aussen) schlechterdings nicht möglich. Abhilfe schafft hier nur das zusätzliche Einfügen von fiktiven Punkten in die (mehr oder weniger großen) Lücken zwischen den Gitterpunkten. Jeder dieser fiktiven Punkte des größeren Modells (entstanden durch Anpassung der Gitterpunktdichte an das eingebettete, genestete Gebiet) liegt innerhalb (oder zumindest auf dem Rand) eines Rechteckes, welches von vier real existierenden Gitterpunkten dieses größeren Gebietes aufgespannt wird. Um einem solchen fiktiven Punkt einen Wert zuweisen zu können, müssen dessen vier "reale" Nachbarpunkte bekannt sein, so daß die Voraussetzungen zur Durchführung einer linearen Interpolation gegeben sind. Deshalb bekommt das Feld innen einen zusätzlichen, von 1 bis 4 laufenden Index, damit es die "Adressen" jeweils aller vier benötigten Stützpunkte aufnehmen kann. Weiters wird ein Feld gewicht desselben Ranges benötigt, das die jeweilige Gewichtung dieser vier Nachbarpunkte bei der Interpolation enthält. Der Randwert f(aussen(n,1)) des eingebetteten Gebietes korrespondiert dann beispielsweise mit dem auf die folgende Weise zu berechnenden, interpolierten Wert des größeren Gebietes:

gewicht(1,n,1)*f(innen(1,n,1))+gewicht(2,n,1)*f(innen(2,n,1))+ +gewicht(3,n,1)*f(innen(3,n,1))+gewicht(4,n,1)*f(innen(4,n,1))

Es ist dabei wiederum zu beachten, daß bei jedem derartigen Einsatz des Feldes innen die Ordnungsvariable n erneut ihren gesamten Wertebereich von 1 bis 2*(ix+iy)*iz zu durchlaufen hat.

Das Unterprogramm einricht vermag in der vorliegenden Form, sämtliche nur denkbaren Verhältnisse der Gitterpunktabstände dx bzw. dy der ineinander geschachtelten Gebiete zu verarbeiten; selbstredend darf auch das Gitter ein- und desselben Gebietes eine unterschiedliche Auflösung in West-Ost- bzw. in Süd-Nord-Richtung aufweisen. Die Verhältnisse der Gitterpunktabstände der genesteten Gebiete in x- bzw. y-Richtung sind in den dazugehörigen Hilfsvariablen xverh und yverh zu finden. Zur Ermittelung dieser Verhältnisse müssen die Prozesse zunächst die ihren Gebieten eigenen Gitterweiten dx und dy dem jeweils nächstgrößeren Gebiet (d.h. dem Prozeß mit entsprechend der nächstkleineren Rangordnungszahl rank) mitteilen. Anschließend kann dann die Belegung der eindimensionalen Adreßfelder erfolgen. Als Reihenfolge bei der Verkettung der Randpunkte zu einem linearen Feld wird dabei der entgegengesetzte Uhrzeigersinn verwendet (also von Süd über Ost und Nord nach West) –, aber im Prinzip ist die genaue Anordnung vollkommen egal. Zu beachten ist nur, daß die Zählvariable n in den Adreßfeldern aussen und innen jeweils zu demselben Punkt im Gitternetz führt.

```
if (rank.gt.0) then
   call mpi_send(dx,1,mpi_double_precision,rank+1,0,
&
                 mpi_comm_world,status,ierror)
   call mpi_send(dy,1,mpi_double_precision,rank+1,0,
&
                 mpi_comm_world,status,ierror)
 end if
 if (rank.lt.size-1) then
   call mpi_recv(xhilf,1,mpi_double_precision,rank+1,0,
&
                 mpi_comm_world,status,ierror)
   xverh=dx/hilf
   call mpi_recv(yhilf,1,mpi_double_precision,rank+1,0,
&
                 mpi_comm_world,status,ierror)
   yverh=dy/hilf
 end if
 n=0
 do k=1,iz
   do i=1,ix
     n=n+1
     do h=1,8
       aussen(n,h)=(h-1)*ix+i+(k-1)*ix*iy
       if (rank.lt.size-1) call zuweisung(innen(1,n,h),
         innen(2,n,h),innen(3,n,h),innen(4,n,h),gewicht(1,n,h),
&
&
         gewicht(2,n,h),gewicht(3,n,h),gewicht(4,n,h),
&
         i0,j0,i,h,k,ix,iy,xverh,yverh)
     end do
   end do
   do j=1,iy
     n=n+1
     do h=1,8
       aussen(n,h)=j*ix+1-h+(k-1)*ix*iy
       if (rank.lt.size-1) call zuweisung(innen(1,n,h),
         innen(2,n,h),innen(3,n,h),innen(4,n,h),gewicht(1,n,h),
&
         gewicht(2,n,h),gewicht(3,n,h),gewicht(4,n,h),
&
         i0,j0,ix+1-h,j,k,ix,iy,xverh,yverh)
&
     end do
   end do
   do i=1,ix
     n=n+1
     do h=1,8
       aussen(n,h)=(iy-h)*ix+i+(k-1)*ix*iy
       if (rank.lt.size-1) call zuweisung(innen(1,n,h),
         innen(2,n,h),innen(3,n,h),innen(4,n,h),gewicht(1,n,h),
&
         gewicht(2,n,h),gewicht(3,n,h),gewicht(4,n,h),
&
```

```
&
         i0,j0,i,iy+1-h,k,ix,iy,xverh,yverh)
     end do
   end do
   do j=1,iy
     n=n+1
     do h=1,8
       aussen(n,h)=(j-1)*ix+h+(k-1)*ix*iy
       if (rank.lt.size-1) call zuweisung(innen(1,n,h),
         innen(2,n,h),innen(3,n,h),innen(4,n,h),gewicht(1,n,h),
&
&
         gewicht(2,n,h),gewicht(3,n,h),gewicht(4,n,h),
Х.
         i0,j0,h,j,k,ix,iy,xverh,yverh)
     end do
   end do
 end do
 return
 end
```

Die Wertezuweisung an die Felder innen bzw. gewicht ist etwas komplizierter und erfolgt aus diesem Grund vorteilhaft im Rahmen einer eigenen Zuweisungsroutine zuweisung:

```
subroutine zuweisung(punkt1,punkt2,punkt3,punkt4,gewicht1,
&
  gewicht2,gewicht3,gewicht4,i0,j0,i,j,k,ix,iy,xverh,yverh)
 integer punkt1,punkt2,punkt3,punkt4,i0,j0,i,j,k,ix,iy,
         xunten,xoben,yunten,yoben
&
 double precision gewicht1, gewicht2, gewicht3, gewicht4,
&
                  xverh, yverh, x, y
 x=(i-1)/xverh
 xunten=int(x)
 xoben=int(x+1d0)
 y=(j-1)/yverh
 yunten=int(y)
 yoben=int(y+1d0)
 punkt1=i0+(j0-1)*ix+xunten+yunten*ix+(k-1)*ix*iy
 punkt2=i0+(j0-1)*ix+xoben+yunten*ix+(k-1)*ix*iy
 punkt3=i0+(j0-1)*ix+xoben+yoben*ix+(k-1)*ix*iy
 punkt4=i0+(j0-1)*ix+xunten+yoben*ix+(k-1)*ix*iy
 gewicht1=(xoben-x)*(yoben-y)
 gewicht2=(x-xunten)*(yoben-y)
 gewicht3=(x-xunten)*(y-yunten)
```

```
gewicht4=(xoben-x)*(y-yunten)
return
end
```

6.3 Das Unterprogramm rand

Im Unterprogramm rand erfolgt die Behandlung der Ränder bzw. Grenzflächen der beteiligten Gebiete. Diese Subroutine stellt gleichzeitig die einzige Möglichkeit des Informationsaustausches der einzelnen Prozesse untereinander dar.

Falls am Rand eine Dämpfungsschicht bzw. bei der Nestung eine Anpassungsschicht zur Anwendung gelangt, müssen zuvor die dafür vorgesehenen, konstanten Mischungskoeffizienten vorbelegt werden:

data koeff/8*0,8*0, & 0.573,0.300,0.131,0.051,0.019,0.007,0.003,0.001, & 0.693,0.405,0.288,0.223,0.183,0.154,0.134,0.118/

Nachfolgend werden nun auf dem gesamten Randbereich – und zwar an jedem Randpunkt extra – die jeweils anzuwendenden Verfahren durchgeführt. Dies geschieht unter Zuhilfenahme der im Unterprogramm einricht definierten Adreßfelder aussen und innen. Diese sorgen dafür, daß im Rahmen einer von 1 bis 2*(ix+iy)*iz – letzteres entspricht gerade der Anzahl der Randpunkte – laufenden Schleife jeder Randpunkt dabei genau einmal vorkommt und darüberhinaus den nächstgelegenen, inneren Punkten des größeren Gebietes in eindeutiger Weise zugeordnet wird. Die internen Details dieser Abbildung sowie die Reihenfolge der Anordnung der Randpunkte in dieser linearen Darstellung werden im Unterprogramm einricht für alle Zeiten festgelegt, so daß man sich darüber bei der eigentlichen Anwendung der Randbedingungen keine Gedanken mehr machen muß. Man sollte sich in diesem Zusammenhang nur merken, daß, um alle Randpunkte in gleicher Weise anzusprechen, jede Aktion stets für alle 2*(ix+iy)*iz Adressen der Felder aussen, innen und gewicht zu wiederholen ist. Das MPI bietet zwar ebenfalls die Möglichkeit, gesonderte Bereiche des Raumgitters zu spezifizieren, welche dann beim Verschieben von Daten zwischen zwei Prozessen im Gesamten, also als Einheit angesprochen werden können, was die Leistungsfähigkeit des parallelen Austausches erheblich verbessern würde. Weil dieses Verfahren allerdings dahingehend mit Einschränkungen verbunden ist, daß nur jeweils die Originalwerte der Variablen verschickt und leider auch empfangen werden können, nicht hingegen wahlweise auch beliebige Bruchteile davon (also Abbildungen der Art $\alpha f \to f$ oder umgekehrt $f \to \alpha f$ mit $0 < \alpha < 1$ nicht funktionieren), erweist sich die bloße Verwendung der vom MPI bereitgestellten Werkzeuge im vorliegenden Fall als nicht praktikabel (Probleme bereitet dabei vor allem die korrekte Formulierung der die Mischungsschicht betreffenden Algorithmen). Aus diesem Grunde wird auf derartige, von MPI ermöglichte Vereinfachungen ganz verzichtet und stattdessen der bereits beschriebene Weg über die "Adreßfelder" gewählt, der sich (trotz einiger Unannehmlichkeiten) als gangbar erweist.

Weil sämtliche, auf einen bestimmten Randpunkt anzuwendenden Rechenschritte in gleicher Weise auch für alle anderen gelten sollen, umschließt den Rest des Unterprogrammes rand eine Schleife mit dem Index i, die über alle 2*(ix+iy)*iz Randpunkte läuft:

do i=1,2*(ix+iy)*iz
.
.
.
end do
return
end

Zwecks der Unterscheidung in Einström- und Ausströmränder werden innerhalb dieser Schleife zunächst die Courantzahlen cou_aussen(rank) am Rand selbst sowie cou_innen(rank-1) an derselben Stelle im Inneren des nächstgrößeren Gebietes ermittelt. Eine positive Courantzahl entspricht einer Bewegung von innen zum Rand hin, wohingegen eine negative Courantzahl eine Verlagerung vom Rand hin zur Mitte des Gebietes bedeutet.

```
cou_aussen(rank)=diffquot(fn(aussen(i,1)),f(aussen(i,1)),
```

&	<pre>f(aussen(i,1)),f(aussen(i,2)))</pre>
coi	<pre>u_innen(rank)=diffquot(gewicht(1,i,1)*fn(innen(1,i,1))+</pre>
&	<pre>gewicht(2,i,1)*fn(innen(2,i,1))+</pre>
&	<pre>gewicht(3,i,1)*fn(innen(3,i,1))+</pre>
&	<pre>gewicht(4,i,1)*fn(innen(4,i,1)),</pre>
&	gewicht(1,i,1)*f(innen(1,i,1))+
&	<pre>gewicht(2,i,1)*f(innen(2,i,1))+</pre>
&	<pre>gewicht(3,i,1)*f(innen(3,i,1))+</pre>
&	gewicht(4,i,1)*f(innen(4,i,1)),
&	gewicht(1,i,1)*f(innen(1,i,1))+
&	gewicht(2,i,1)*f(innen(2,i,1))+
&	<pre>gewicht(3,i,1)*f(innen(3,i,1))+</pre>
&	<pre>gewicht(4,i,1)*f(innen(4,i,1)),</pre>
&	gewicht(1,i,2)*f(innen(1,i,2))+
&	gewicht(2,i,2)*f(innen(2,i,2))+
&	<pre>gewicht(3,i,2)*f(innen(3,i,2))+</pre>
&	gewicht(4,i,2)*f(innen(4,i,2)))

Die Berechnung erfolgt mithilfe von einfachen Differenzenquotienten. Um die dabei unter Umständen auftretenden Probleme bei versuchter Division durch Null abzufangen, erhält dieser Teil der Rechnung eine eigene Unterfunktion diffquot:

```
double precision diffquot(x1,x2,x3,x4)
double precision x1,x2,x3,x4
if (abs(x3-x4).lt.1d-9) then
   diffquot=0d0
else
   diffquot=(x1-x2)/(x3-x4)
end if
return
end
```

Damit das eingebettete Gebiet (bzw. vielmehr der dazugehörige Prozeß) weiß, ob von außen ein Antrieb erfolgt, ist ein Austausch der Courantzahlen zwischen den Prozessen erforderlich. Ein Gebiet benötigt zum Vergleich mit seinen eigenen Courantzahlen cou_aussen(rank) und cou_innen(rank) diejenigen des nächstgrößeren, cou_innen(rank-1), bzw. des nächstkleineren, eingebetteten Gebietes, cou_aussen(rank+1) (Die am Rand ermittelte Courantzahl cou_aussen(rank) des Gebietes rank korrespondiert dabei nämlich mit einer im Gebietsinneren berechneten Courantzahl cou_innen(rank-1) des Prozesses mit der nächstkleineren Rangordnungsnummer rank-1). Eine Blockierung des parallelen Systems derart, daß sämtliche Prozesse sich in einem Wartezustand befinden, kann dabei nicht eintreten. Im übrigen wird dafür Sorge getragen, daß vom Empfänger nur die passenden und deshalb mit einer besonderen Kennung versehenen Botschaften entgegengenommen werden.

Falls am Einström- oder Ausströmrand die Nestung lediglich die Randpunkte selbst betreffen soll und darüberhinaus keinerlei Abhängigkeit der Randbedingungen vom Strömungszustand bestehen soll, dann ist vom Programm der folgende Abschnitt abzuarbeiten:

```
if (ausstroem.eq.1) then
   if(cou_aussen(rank.gt.0) then
     fn(aussen(i,1))=f(aussen(i,2))
     if (zweiwege.and.rank.gt.0)
       call mpi_send(fn(aussen(i,1)),1,mpi_double_precision,
&
                     rank-1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
&
   end if
   if (zweiwege.and.rank.lt.size-1.and.cou_aussen(rank+1).gt.0)
     call mpi_recv(fn(innen(1,i,1)),1,mpi_double_precision,
&
                   rank+1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
&
 end if
 if (einstroem.eq.1) then
   if (rank.gt.0.and.cou_innen(rank-1).lt.0)
     call mpi_recv(fn(aussen(i,1)),1,mpi_double_precision,
&
                   rank-1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
&
   if (rank.lt.size-1.and.cou_innen(rank).lt.0)
     call mpi_send(gewicht(1,i,1)*fn(innen(1,i,1))+
&
                   gewicht(2,i,1)*fn(innen(2,i,1))+
&
                   gewicht(3,i,1)*fn(innen(3,i,1))+
&
Х.
                   gewicht(4,i,1)*fn(innen(4,i,1)),1,
```

& mpi_double_precision,rank+1,0,mpi_comm_world,status,ierror) end if

Soll stattdessen eine modifizierte, d.h. in erster Linie: an die Nestung angepaßte Ausstrahlungsbedingung (welche eigentlich nur für den seitlichen, offenen Rand definiert ist), zur Anwendung gelangen, so ist der Programmablauf folgendermaßen fortzusetzen:

```
if (ausstroem.eq.2) then
   if (cou_aussen(rank).gt.0) then
     if (cou_aussen(rank).gt.1d0) cou_aussen(rank)=1d0
     fn(aussen(i,1))=(1d0-cou_aussen(rank))*f(aussen(i,1))+
                     cou_aussen(rank)*f(aussen(i,2))
&
     if (zweiwege.and.rank.gt.0)
&
       call mpi_send(f(aussen(i,2)),1,mpi_double_precision,
&
         rank-1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
   end if
   if (zweiwege.and.rank.lt.size-1
               .and.cou_aussen(rank+1).gt.0) then
&
     call mpi_recv(hilf,1,mpi_double_precision,rank+1,0,
       mpi_comm_world,status,ierror)
&
     if (cou_aussen(rank+1).gt.1d0) cou_aussen(rank+1)=1d0
     fn(innen(1,i,1)=(1d0-cou_aussen(rank+1))*f(innen(1,i,1))+
                     cou_aussen(rank+1)*hilf
&
   end if
 end if
 if (einstroem.eq.2) then
   if (rank.gt.0.and.cou_innen(rank-1).lt.0) then
     if (cou_innen(rank-1).lt.-1d0) cou_innen(rank-1)=-1d0
     call mpi_recv(hilf,1,mpi_double_precision,rank-1,0,
       mpi_comm_world,status,ierror)
&
     fn(aussen(i,2))=(1d0+cou_innen(rank-1))*f(aussen(i,2))-
                     cou innen(rank-1)*hilf
&
   end if
   if (rank.lt.size-1.and.cou_innen(rank.lt.0)
&
     call mpi_send(gewicht(1,i,1)*f(innen(1,i,1))+
                   gewicht(2,i,1)*f(innen(2,i,1))+
&
                   gewicht(3,i,1)*f(innen(3,i,1))+
&
                   gewicht(4,i,1)*f(innen(4,i,1)),1,
&
       mpi_double_precision,rank+1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
&
 end if
```

Bei Verwendung einer Mischungszone in Form einer Dämpfungsschicht am Ausströmrand bzw. einer Anpassungsschicht am Einströmrand ist hingegen wie folgt vorzugehen:

```
if (ausstroem.ge.3) then
   if (cou_aussen(rank).gt.0) then
     if (ausstroem.ne.4.or.cou_aussen.gt.1d0) cou_aussen(rank)=1d0
     do j=1,8
       fn(aussen(i,j))=(1d0-cou_aussen(rank)*koeff(ausstroem,j))*
&
                       fn(aussen(i,j)
     end do
     if (zweiwege.and.rank.gt.0)
       call mpi_send(fn(aussen(i,1)),1,mpi_double_precision,
&
         rank-1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
&
   end if
   if (zweiwege.and.rank.lt.size-1.and.cou_aussen(rank+1).gt.0)
&
     call mpi_recv(fn(innen(1,i,1)),1,mpi_double_precision,
       rank+1,0,mpi_comm_world,status,ierror)
&
 end if
 if (einstroem.ge.3) then
   if (rank.gt.0.and.cou_innen(rank-1).lt.0) then
     if (einstroem.ne.4.or.cou_innen(rank-1).lt.-1d0)
&
       cou innen(rank-1)=-1d0
     do j=1,8
       call mpi_recv(hilf,1,mpi_double_precision,rank-1,0,
         mpi_comm_world,status,ierror)
&
       fn(aussen(i,j))=fn(aussen(i,j))-cou_innen(rank-1)*
                       koeff(einstroem,j)*(hilf-fn(aussen(i,j)))
&
     end do
   end if
   if (rank.lt.size-1.and.cou_innen(rank).lt.0) then
     do j=1,8
       call mpi_send(gewicht(1,i,j)*fn(innen(1,i,j))+
                     gewicht(2,i,j)*fn(innen(2,i,j))+
&
                     gewicht(3,i,j)*fn(innen(3,i,j))+
&
                     gewicht(4,i,j)*fn(innen(4,i,j)),1,
&
         mpi_comm_world,status,ierror)
&
     end do
   end if
 end if
```

Bleibt noch anzumerken, daß bei der Zweiwege-Nestung (zweiwege-.true.) und der dabei zwangsläufig vorkommenden Übertragung von Informationen vom inne-

ren zum äußeren Gebiet, also demnach auch vom Gebiet mit der größeren Gitterpunktdichte zu demjenigen mit einer entsprechend geringeren, eine ein-eindeutige Abbildung zwischen einander korrespondierenden Gitterpunkten beider Gebiete schlechterdings nicht mehr möglich ist. Dies wirkt sich dermaßen aus, daß zwar mithilfe einer geeigneten Interpolation Werte des feineren Gitternetzes auf die Punkte des Gitters mit der gröberen Maschenweite übertragbar sind; bei der Übermittelung in die umgekehrte Richtung ist hingegen keine – oder zumindest keine einfach darstellbare – Zuordnung der Gitterpunkte beider Netze zueinander mehr durchführbar. Der Funktionswert an einem Gitterpunkt des genesteten Gebietes müßte sich dabei nämlich auf mehrere Punkte des größeren Gebietes (in geeignet festzulegender Gewichtung) verteilen. Dies würde einen zusätzlichen Rechen- und vor allem Speicheraufwand (man denke dabei nur an die zur Zwischenspeicherung der einzelnen Anteile in Hilfsvariablen) erfordern und wird aus diesen Gründen hier nicht praktiziert. Stattdessen erfolgt eine gewissermaßen versetzte Übertragung, weil nämlich als Empfänger nur jeweils einer der eigentlich vier Eckpunkte des durch das Adreßfeld innen vorgegebenen, einen Punkt des feineren Netzes umspannenden Rechteckes ausgewählt wird. Auf diesen Punkt wird dann natürlich der komplette ursprüngliche Wert des Senders übertragen, so daß eine Aufteilung der Informationen auf mehrere angrenzende Punkte nicht mehr notwendig ist. Aufgrund der nun allerdings nicht mehr exakt erfüllbaren Koinzidenz von Gitterpunkten ineinander verschachtelter Gebiete begeht man dabei strenggenommen einen Fehler. Die Abweichung beträgt allerdings maximal einen Gitterpunkt und hält sich damit also in Grenzen.

Bei Anwendung einer Mischungsschicht im Rahmen der Nestung stellt sich in Hinsicht auf die Erweiterung zu einer Zweiwege-Nestung das Problem, welcher Verlauf des Mischungskoeffizienten für die Informationsübertragung vom genesteten zum äußeren Gebiet verwendet werden soll (vom Inneren aus gesehen zum Rand hin ansteigend, abfallend oder vielleicht auch zunächst anwachsend und daraufhin wieder stetig gegen Null zurückgehend, um auf beiden Seiten der Grenzfläche eine größtmögliche Kontinuität sicherzustellen?). Wegen dieser Unwägbarkeiten wird auf die gesonderte Implementierung einer Zweiwege-Mischungsschicht verzichtet und stattdessen auch bei der Anpassungsschicht dieselben Formulierungen im Hinblick auf die Nestung mit Rückkoppelung verwendet wie bereits im einfachsten Fall mit der Beschränkung der Adaption auf den Randpunkt selbst. Ansonsten aber, d.h. natürlich in erster Linie bei der erweiterten Ausstrahlungsbedingung, erfolgen stets sinngemäße Anpassungen der Algorithmen an die jeweilige Problemstellung.

7 Ergebnisse von Modellrechnungen

Dieses abschließende Kapitel liefert die mit dem einfachen Flachwassermodell sowie dem komplexeren meteorologischen Modell KAMM erzielten Resultate. Nach einer separaten Untersuchung der verschiedenen Strömungsparameter erfolgt als Test für das Zusammenwirken sämtlicher Bestandteile des Modelles ein realitätsnahes Beispiel: die Überströmung einer Bodenwelle.

7.1 Methoden der Verifikation von Randbedingungen

Um die Brauchbarkeit von Randbedingungen zu überprüfen, bieten sich generell zwei grundlegend verschiedene Ansätze an. In Analogie zur Beschreibung eines Strömungsfeldes (Lagrange-Betrachtung der Trajektorien im Gegensatz zur Eulerschen Betrachtung des Stromfeldes), läßt sich zum einen ein vordefiniertes Wellenpaket formieren, dem ein Bewegungsimpuls mitgegeben wird, so daß es auf die Begrenzungsfläche der beiden Gebiete zu wandert; im weiteren Verlauf wird die Veränderung des Wellenpaketes hinsichtlich Form und Größe – verglichen mit dem Anfangszustand – untersucht. Dabei muß jedoch unterschieden werden zwischen Anderungen, die durch das jeweilige Modell verursacht werden (z.B. durch Diffusion, Reibung und sonstige Quellen oder Senken der betrachteten Größe) und solchen Änderungen, die kausal von der Formulierung der Randbedingungen herrühren. Da ausschließlich letztere von Interesse sind, empfiehlt sich ein derartiges Vorgehen vor allem bei Systemen, die eine ungestörte Advektion oder Propagation von Wellenpaketen unter Beibehaltung von deren Gestalt zulassen. Bei einem rein advektiven Modell treten allerdings überhaupt keine störenden Reflexionen an den Rändern auf. Die Existenz einer reflektierten Welle hat zur Bedingung, daß das zugrunde gelegte System die allseitige Ausbreitung einer Störung verursachen kann. Im einfachsten Fall reicht dazu eine Wellengleichung der Form $\partial^2 f / \partial t^2 = c^2 \Delta f$ aus. In der Literatur wird in der Regel eine entsprechende Funktionsgleichung zur Beschreibung von Flachwasserwellen verwendet (dann gilt $c^2 = q H$ mit der Schwerebeschleunigung $q = 9.81 \,\mathrm{m/s^2}$ und der Wassertiefe bzw. Dicke der Atmosphärenschicht H), um mittels eines solchen einfachen Modells die Verwendbarkeit diverser Randbedingungen zu überprüfen. Ziel ist es dabei, die aufgrund einer Überspezifizierung der Funktionswerte am Rand unvermeidlich auftretende reflektierte Welle bezogen auf die maximale Auslenkung der einfallenden Welle möglichst zu minimieren (eine grundlegende Forderung an die Spezifizierung der Randfläche). Bei der Einführung und anfänglichen Diskussion der einzelnen Randbedingungen wird im folgenden der besseren Ubersichtlichkeit halber ein derartiges, sozusagen einfachst mögliches System verwendet. Als weitere Vereinfachung soll auch zunächst die Betrachtung der dazugehörigen eindimensionalen Form $\partial^2 f / \partial t^2 = c^2 \partial^2 f / \partial x^2$ genügen.

Liegt ein komplexeres Modell vor (wie z.B. das KAMM), und lassen sich dabei

einzelne Wellenpakete nicht mehr entsprechend gut verfolgen, da sie zu starken und/oder raschen modellbedingten und somit internen Umwandlungen unterworfen sind, die nicht durch die Wahl der Randbedingungen verursacht werden, so muß ein anderer, ungleich aufwendigerer Weg beschritten werden, um dennoch einen zahlenmäßigen Vergleich bei der Anwendung verschiedener Randbedingungen anstellen zu können. Es muß dabei zu einem bestimmten Zeitpunkt das bestehende Strömungsfeld mit demjenigen – wenngleich fiktiven – Strömungsfeld verglichen werden, das eintreten würde, falls die Randbedingungen den Idealfall eines wirklichen offenen Randes simulieren könnten. Die Uberbestimmtheit der Variablen am Rand zusätzlich zu den Anfangsbedingungen erlaubt im Realfall allerdings kein völlig passives Verhalten gegenüber auf die Randfläche zulaufenden Störungen. Alternativ dazu läßt sich zu Vergleichszwecken das Strömungsfeld eines Gebietes heranziehen (selbstverständlich zu demselben Zeitpunkt), welches sehr viel größere Ausmaße hat als das eigentlich zu untersuchende Gebiet und dieses weiträumig erfaßt. Dabei wird von der Forderung Gebrauch gemacht, daß die Randbedingungen derart zu formulieren sind, daß sich das Modell so verhält, als ob überhaupt keine künstlichen Berandungen vorhanden wären. Wird der Umfang des Vergleichsgebietes so ausreichend groß gewählt, daß innerhalb des Betrachtungszeitraumes keine Störungen von der Berandung dieses Gebietes bis in den zentralen, eigentlich interessierenden Bereich vorstoßen können,¹⁴ dann bedürfen die seitlichen Ränder dieses großen Gebietes keiner speziellen Behandlung.

Zu Vergleichszwecken werden die mittleren quadratischen Abweichungen der zu betrachtenden Strömungsfelder zum Vergleichsfeld desselben Zeitpunktes, bezogen auf die mittleren Quadrate der Absolutwerte dieses Vergleichsfeldes, herangezogen: $\sum_i (f_i - f_{\text{vergl},i})^2 / \sum_i f_{\text{vergl},i}^2$ [Durran et al. (1993), Paschen (1980)]. Im späteren Verlauf bei der Untersuchung diverser Randbedingungen im Modell KAMM wird von dieser Methode der quantitativen Überprüfung und des Vergleichs der Randbedingungen untereinander Gebrauch gemacht.

7.2 Beschreibung der Prüf- und Auswerteverfahren

Bei Proberechnungen unter Verwendung von verschiedenen Rand- und Nestungsbedingungen erscheint es wenig sinnvoll, realistische, aber zugleich hochgradig komplexe Modellkonfigurationen zu verwenden. Diese wären einer einfachen Interpretation der Ergebnisse im Sinne der Vergleichbarkeit diverser Randbedingungen eher abträglich. Stattdessen sei das Hauptaugenmerk auf die Anschaulichkeit der zu erwartenden Resultate gerichtet. Darum werden lediglich relativ simple Anfangsbedingungen vorgegeben, welche wiederum jeweils nur einer bestimmten

 $^{^{14}}$ Dabei kann das Courantsche Stabilitätskriterium zu Rate gezogen werden, das besagt, daß numerische Störungen mit einer maximalen Geschwindigkeit von $c = \Delta x / \Delta t$ propagieren

Variablen gelten sollen, wohingegen sämtliche anderen, vorbelegbaren Parameter mit dem Startwert Null besetzt werden.

Darüberhinaus wird zwar mit einem rechteckigen (d.h. unter Berücksichtigung der dritten Dimension vielmehr quaderförmigem) Simulationsgebiet gerechnet; von Interesse in bezug auf die Problematik der Behandlung der Ränder ist allerdings nur das Verhalten des Strömungsmusters senkrecht zu den Randflächen. Es genügt folglich, eine zweidimensionale Schnittfläche beispielsweise in der x-z-Ebene zu betrachten. Der horizontale Windvektor $\vec{v}_{\rm H} = (u, v)$ teilt sich dann in eine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Randfläche (u) und eine parallel dazu verlaufende (v) auf. Es werden stets entweder nur von außen auf die Verbindungsfläche der ineinander verschachtelten Gebiete zulaufende Strömungsgebilde zur Überprüfung der Nestungsbedingungen eingesetzt oder – im umgekehrten Fall – anfangs nur innen vorhandene, von Null verschiedene Auslenkungen mit der Strömung zum Rand hin transportiert, um die Brauchbarkeit der Randbedingungen am nunmehr offenen Rand zu testen.

Weil der Bereich des Simulationsgebietes, den das eingebettete, genestete Gebiet überdeckt, zugleich auch einen Bestandteil des größeren Gebietes darstellt, lassen sich darauf Vergleiche zwischen den Werten beider Gitternetze anstellen. Einerseits können natürlich die Absolutwerte selbst verglichen werden, um dabei eventuelle, charakteristische Merkmale, die auf eine Überbestimmung der Randbedingungen hindeuten, zu erkennen. Derartiges wäre aber nur mit Momentanbildern der Strömungsverteilung zu erreichen, die jedoch – gerade auch im Hinblick auf die zeitliche Entwicklung der Strömung – weniger aussagekräftig sind. Sinnvoller erscheint in diesem Zusammenhang die Betrachtung der Korrelation einander entsprechender Teile der sich überlappenden Bereiche, vor allem aber der zeitlichen bzw. räumlichen Variabilität dieser Korrelation. Letztere eignen sich nämlich gut zur Verifikation der folgenden, grundlegenden Forderung im Zusammenhang mit genesteten Systemen: Die begrenzten bzw. genesteten Gebiete sollen sich für alle Zeiten so verhalten, als ob keinerlei (künstliche) Berandungen bzw. Grenzflächen vorhanden wären! Im Klartext bedeutet dies, daß das betrachtete Gebiet im Vergleich zu einem mitlaufenden, wesentlich größeren (idealerweise sogar unendlich ausgedehntem) Referenzgebiet möglichst geringe Unterschiede in den Werten an den einzelnen Gitterpunkten aufweisen soll. In der Praxis läßt sich ein derartiges Gebiet erheblich größeren Ausmaßes selbstverständlich (vor allem natürlich aus Speichergründen) nicht realisieren. Deswegen wird aus Effizienzgründen in einem solchen Fall auf das sowieso bereits vorhandene größere, das Nest aufnehmende Gebiet zurückgegriffen.

Bei der Überprüfung der Güte der durchgeführten Nestung kann die räumliche Verteilung der Korrelation beider Gebiete herangezogen werden. Direkt am Verbindungspunkt sollte diese Korrelation – bedingt durch den äußeren Antrieb – immer maximal sein, also der entsprechende Korrelationskoeffizient gerade Eins betragen; mit zunehmender Entfernung vom Rand wird der Korrelationskoeffizient hingegen in der Regel abnahmen. Ausschlaggebend hierfür ist weniger ein "Gedächtnisverlust" des Nestes in bezug auf den nun bereits einige Zeit zurückliegenden Antrieb oder das Auftreten eigenständiger Modifizierungen des Strömungszustandes im Gebietsinneren; vielmehr ist dafür in erster Linie die direkte Umsetzung der Nestungsbedingung selbst verantwortlich.

Die Brauchbarkeit von Randbedingungen für den offenen, durchströmten Rand läßt sich im Gegensatz dazu mithilfe der zeitlichen Veränderung der Korrelation beider Gesamtgebiete (natürlich jeweils nur auf dem beiden gemeinsamen, überlappenden Bereich) kontrollieren. Zu Beginn ist diese Korrelation aufgrund identischer Anfangsbedingungen maximal, der dazugehörige Korrelationskoeffizient mithin Eins. Im weiteren Verlauf macht sich die (leider unvermeidbare) Überspezifizierung der Randbedingungen in zunehmendem Maße bemerkbar, was sich in einer Verschlechterung der anfänglichen Synchronisation beider Gebiete manifestiert. Damit verbunden ist selbstredend auch eine Abschwächung der Korrelation. Wie bereits erwähnt, sollten beide Gebiete im Idealfall hingegen stets exakt dasselbe Strömungsmuster zeitigen.

7.3 Verwendete Rand- und Nestungsbedingungen

7.3.1 Nestung durch Überschreiben des Randes

Zu jedem Zeitpunkt erfolgt lediglich eine Übernahme des Randwertes des inneren Gebietes vom entsprechenden Gitterpunkt des äußeren Gebietes gemäß

$$f_b^{t+1} \leftarrow \tilde{f}_b^{t+1} \tag{211}$$

Damit wird zwar die Anpassung an von außen einströmende Wellen sichergestellt. Falls hingegen von innen kommende Wellen die Grenzfläche nach außen passieren wollen, werden keine besonderen Vorkehrungen getroffen, um dabei eventuell auftretende, unerwünschte Reflexionen zu vermeiden.

7.3.2 Strahlungsbedingung

Solange von außen kein Antrieb erfolgt, soll direkt am Rand die lokale Advektionsgleichung $\partial f/\partial t + c \partial f/\partial x = 0$ gelten, welche in der Differenzenform wie folgt lautet:

$$f_b^{t+1} \leftarrow c \,\frac{\Delta t}{\Delta x} \, f_{b-1}^t + \left(1 - c \,\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \, f_b^t \tag{212}$$

Die Berechnung der Phasengeschwindigkeit erfolgt dabei mit derselben Formel, die allerdings entweder einen Gitterpunkt weiter innen oder aber zum vorherigen Zeitschritt angewandt wird.¹⁵

7.3.3 Anpassungsschicht

Eine verbesserte Behandlung im Falle des gleichzeitigen Auftretens von ein- und ausströmenden Wellen bringt die Anwendung einer mehrere Gitterweiten umfassenden Anpassungsschicht, in welcher die zeitliche Tendenz als proportional zur Differenz der Funktionswerte beider Gebiete entsprechend $\partial f/\partial t = k \left(\tilde{f} - f\right)$ gesetzt wird. In Differenzenform lautet diese Gleichung

$$f_i^{n+1} \leftarrow k \,\Delta t \,\tilde{f}_i^n + (1 - k \,\Delta t) \,f_i^n \tag{213}$$

$$f_i^{n+1} \leftarrow \alpha \,\tilde{f}_i^n + (1-\alpha) \,f_i^n \tag{214}$$

Der Mischungskoeffizient $\alpha = k \Delta t$, welcher bei der Kombinierung den jeweiligen Anteil der beiden Gebiete bestimmt, kann dabei beliebige Werte im Rahmen $0 < \alpha < 1$ annehmen. Ein Nachteil dieser Randspezifizierung soll allerdings nicht unerwähnt bleiben: Es können jetzt nämlich Deformationen auftreten, die darin begründet liegen, daß durch die endliche Breite der Anpassungsschicht im Gegensatz zu den zuvor behandelten "Punkt-Randbedingungen" nunmehr eine gewisse Wellenlängenabhängigkeit unvermeidbar ist.

7.4 Überprüfung der Randbedingungen im Flachwassermodell

7.4.1 Abhängigkeit von der Courantzahl

Es soll nun untersucht werden, inwiefern die Qualität der einzelnen Randbedingungen von den Strömungsumständen abhängt. Weil möglichst allgemeingültige Aussagen wünschenswert sind, erweisen sich dimensionslose Unterscheidungsmerkmale als sinnvoll. Gemäß Gleichung (193) aus Kapitel 5 hängt die prognostische Form der eindimensionalen Wellengleichung in folgender Weise von der dimensionslosen Courantzahl *Cou* ab:

$$f_i^{n+1} = 2f_i^n - f_i^{n-1} + Cou^2 \left(f_{i-1}^n - 2f_i^n + f_{i+1}^n \right)$$
(215)

Bei sehr kleiner Courantzahl $Cou \approx 0$ bewegen sich die Strömungsgebilde demnach nur sehr langsam fort. Mit wachsendem Betrag von Cou erfolgt ein immer

¹⁵Für Courant-Zahlen nahe bei Eins sind diese beiden Möglichkeiten praktisch äquivalent.

rascherer Transport, wobei allerdings gemäß dem Courantschen Stabilitätskriterium lediglich für |Cou| < 1 eine ungestörte Propagation sichergestellt ist. Bei Überschreiten dieser Schwelle von |Cou| = 1 stellen sich hingegen numerische Instabilitäten ein.

Die folgenden Darstellungen beschreiben die Resultate aus zahlreichen Propagationen von Einzelwellen in Form der Gaußschen Glockenkurve $\exp(-k x^2)$. Die Abbildung 7 zeigt die anfängliche Lage zweier Wellen im genesteten und im äußeren Gebiet. Die Propagationsrichtung ist durch Pfeile angedeutet. Der senkrechte Strich in den Darstellungen soll der Trennung des genesteten inneren Gebietes (links davon) vom gröberen äußeren Gebiet (rechts davon) dienen. Der Kurvenverlauf innerhalb des feineren Gebietes ist in der Darstellung durch breitere Linien hervorgehoben.



Abbildung 7: Ausgangslage der Wellen in beiden Gebieten

Die Wellen sind entweder zwecks äußeren Antriebes zunächst nur außerhalb des genesteten Gebietes vorhanden und bewegen sich anschließend auf die Verbindungsfläche beider Gebiete zu, die somit zu einem Einströmrand wird. Registriert wird dann die Transmissivität dieser Welle, die im Idealfall Eins betragen sollte. Im anderen Fall läuft hingegen eine von innen kommende Welle auf den Rand des Nestes zu und wird dort – je nach Güte der verwendeten Randbedingung mehr oder weniger stark – wieder ins Innere zurückreflektiert. Letzteres charakterisiert demnach einen Ausströmrand. Die Reflektivität der Welle in bezug auf die jeweilige Randbedingung wird wiederum aufgezeichnet. Die Abhängigkeit von der Courantzahl *Cou* zeigen die Abbildungen 8–11.

Am Einströmrand erweisen sich die Abhängigkeiten von der Courantzahl beinahe überall als minimal (Abbildungen 8 und 9). Lediglich bei Verläufen des Mi-



Abbildung 8: Transmissivität am genesteten Rand in Abhängigkeit von der CourantzahlCou



Abbildung 9: Transmissivität am genesteten Rand in Abhängigkeit von der Courantzahl Cou – Mischungskoeffizienten nach Lehmann (1993) – siehe Tabelle 5 (Seite 61)

schungskoeffizienten, die eigentlich nur für sehr kleine Courantzahlen vorgesehen sind und deren Anwendung schon aus diesem Grunde über ein breiteres Intervall von *Cou* hinweg nicht sinnvoll ist, zeigen sich Abweichungen von der sonst annähernd optimalen Transmission. Der oszillierende Kurvenverlauf zu größeren Courantzahlen *Cou* \rightarrow 1 hin hat in erster Linie durch die numerische Approximierung bedingte Ursachen (siehe hierzu Kapitel 2).



Abbildung 10: Abhängigkeit der Reflektivität am offenen Rand von der CourantzahlCou

Am Ausströmrand ergeben sich hingegen teilweise deutlich gerichtete Kurvenverläufe (Abbildungen 10 und 11). Die durchweg geringsten Reflektivitäten weist laut Abbildung 10 die Ausstrahlungsrandbedingung auf. Mit Abstrichen gilt dies auch für den extrapolierten Rand, wenn die in der Strömung vorherrschenden Courantzahlen näher bei Eins als bei Null liegen. Anhand der Abbildung 11 läßt sich überprüfen, daß die für bestimmte Intervalle von *Cou* als optimal berechneten Mischungskoeffizienten auch wirklich mit minimierten Reflektivitäten innerhalb dieser Bereiche korrespondieren.

7.4.2 Abhängigkeit von der Wellenlänge

Die zweite dimensionslose Größe neben der Courantzahl *Cou*, hinsichtlich derer eine Abhängigkeit der Transmissivität am genesteten bzw. der Reflektivität am offenen Rand denkbar ist, stellt die Wellenlänge $\lambda = n \Delta x$ der Strömungsgebilde in Vielfachen n der Gitterweite Δx dar (Abbildungen 12 und 13).

Obgleich im kurzwelligen Bereich mit zunehmender Wellenlänge ein leichter Anstieg sowohl der Transmissivität in Abbildung 12 als auch der Reflektivität in Ab-



Abbildung 11: Reflektivität am offenen Rand in Abhängigkeit von der Courantzahl Cou – Dämpfungskoeffizienten nach Lehmann (1993) – siehe Tabelle 5 (Seite 61)



Abbildung 12: Transmissivität am genesteten Rand in Abhängigkeit von der relativen Wellenlänge $n = \lambda/\Delta x$



Abbildung 13: Reflektivität am offenen Rand in Abhängigkeit von der relativen Wellenlänge $n=\lambda/\Delta x$

bildung 13 erfolgt, hält sich die Variabilität des Kurvenverlaufes doch in Grenzen. Eine Abhängigkeit des Randverhaltens von der Breite der Wellengebilde kann also in erster Näherung unberücksichtigt bleiben. Damit erfährt die analytische Ermittelung der am besten geeigneten Dämpfungskoeffizienten in Kapitel 4 eine Bestätigung. Dort wurde konstatiert, daß die Dämpfung innerhalb einer Teilschicht des Randbereiches *nur* von der dort gerade gültigen Courantzahl abhängt, von jeglichen anderen Strömungseigenschaften hingegen unabhängig ist.

7.5 Überprüfung der Randbedingungen im KAMM

7.5.1 Beschreibung der Test-Konfigurationen

Zunächst sollen anhand einer einfachen Modellkonfiguration, welche lediglich den Transport von Störungen in der Strömung mit einer durch den geostrophischen Wind vorgegebenen Advektionsgeschwindigkeit ermöglicht, die prinzipielle Verwendbarkeit der diversen Nestungsbedingungen sowie deren programmiertechnische Umsetzung überprüft werden. Anschließend erfolgt dann anhand eines Anwendungsbeispiels mit Topographie die gemeinsame Betrachtung sämtlicher prognostischer Variablen, wobei für jede einzelne Größe jeweils die zuvor ermittelten, am besten geeigneten Rand- bzw. Nestungsbedingungen verwendet werden.

Es wird (wie auch in den folgenden Abschnitten) ein Gitternetz mit den horizontalen Abmessungen 60×60 und 30 Höhenschichten bei einer maximalen Höhe

von 7.500 m benutzt. Die Gitterweite des größeren Gebietes beträgt in der Horizontalen dx = dy = 1.000 m. Die Gitterpunkte des Nestes befinden sich hingegen in einem gegenseitigen Abstand von dx = dy = 500 m. Zumindest im KAMM ist es dabei üblich, für das Verhältnis der Gitterweiten der genesteten Gebiete eine Zweierpotenz zu wählen (obwohl mithilfe der in der Programmdokumentation beschriebenen Erweiterungen durchaus auch beliebige, "krumme" Verhältnisse dx/dx bzw. dy/dy möglich wären). Als höhenkonstanter, d.h. auf allen Höhenschichten gleichstarker geostrophischer Wind wird $u_g = \pm 10 \text{ m/s}$ vorgegeben. Dieser für die Advektion der Strömungsgebilde verantwortliche geostrophische Wind weht dann senkrecht zu der *y-z*-Grenzfläche der genesteten Gebiete und legt durch seine Richtung in Verbindung mit der Lage der anfänglichen Auslenkung der betrachteten prognostischen Größe fest, ob es sich bei dieser Grenzfläche um einen Einström- bzw. einen Ausströmrand handelt.

Normalerweise liegt das genestete Gebiet mehr oder weniger mittig innerhalb des größeren Gebietes. Es entspricht ja gerade dem Sinn der Nestung, daß man einen zentralen Bereich des Simulationsgebietes gerne etwas besser aufgelöst hätte, ohne daß dadurch einerseits bei durchweg höherer Auflösung eine Vervielfachung der Rechenzeit und des Speicherbedarfes einhergehen oder andererseits bei Beschränkung auf diesen zentralen Bereich jegliche Informationen über weiter außen liegende Zonen verloren gehen würden. Um hier allerdings zwischen den beiden Gebieten gut unterscheiden zu können (vor allem natürlich im Hinblick auf die Vorgabe der Anfangsbedingungen), wird das genestete Gebiet ausnahmsweise an den Rand des das Nest aufnehmenden Gebietes plaziert. Der überlappende Bereich beider Gebiete umfaßt dann gerade die Hälfte des größeren Gebietes. Die Trennungslinie verläuft derart, daß das größere Gebiet von der Grenzfläche in zwei gleichgroße Teile zerlegt wird. Es ergibt sich dann bei der Betrachtung ein- und auslaufender Strömungsgebilde ein dahingehend symmetrisches Bild, daß diese immer von einer Hälfte in die jeweils andere befördert werden.¹⁶ Die Nestungsbzw. Randbedingungen werden getrennt voneinander ausprobiert, indem entweder eine anfänglich nur außen oder aber lediglich im Bereich des inneren Gebietes vorhandene Welle in Form einer Gaußschen Glockenkurve mit dem geostrophischen Wind in das genestete Gebiet hinein bzw. aus diesem heraus auf dessen offenen Rand zuläuft. Entsprechend der gewünschten Transportrichtung ist das Vorzeichen von u_{g} zu wählen. Die Abbildung 14 zeigt die anfängliche Lage zweier derartiger Wellenpakete. Die Propagationsrichtung ist durch Pfeile angedeutet. Der senkrechte Strich in den Darstellungen soll der Trennung des genesteten inneren Gebietes (links davon) vom gröberen äußeren Gebiet (rechts davon) dienen.

¹⁶Bei der Untersuchung der Randbedingungen am offenen, durchströmten Rand trifft diese Aussage strenggenommen nur auf das größere Gebiet zu, auf dem dasselbe Strömungsmuster zu Vergleichszwecken anfänglich parallel mitläuft; an der Grenzfläche beider Gebiete besteht hingegen selbstverständlich keinerlei Koppelung – eine Informationsübertragung käme erst unter Hinzuschaltung der Zweiwege-Nestung zustande.

Der Kurvenverlauf innerhalb des feineren Gebietes ist in der Darstellung durch breitere Linien hervorgehoben.



Gitterpunkte in der Horizontalen

Abbildung 14: Ausgangslage der Wellen in beiden Gebieten

7.5.2 Randbedingungen von Wasserdampf und Flüssigwassergehalt

Zunächst sei der Fall einer Flüssigwasserwolke betrachtet, die sich in das genestete Gebiet hinein- bzw. aus diesem hinausbewegen soll.¹⁷ Die Abbildungen 15 und 16 liefern die dazugehörigen Korrelationen der beiden Gebiete. Die verwendeten Wellen haben – genauso wie beim zuvor untersuchten Flachwassermodell – die Form einer Gaußschen Glockenkurve.

Gemäß Abbildung 15 ist unabhängig von der Wahl der Nestungsbedingung eine über den gesamten gemeinsamen Bereich hinweg hervorragende Korrelation des äußeren und des inneren Gebietes zu beobachten. Lediglich am Randpunkt selbst sowie an dessen direkten Nachbarpunkten verschwindet die gute Korrelation, was allerdings, speziell bei der Mischungsschicht, an der – durchaus erwünschten – allmählichen Anpassung des Nestes an das äußere Gebiet liegt. Daß im Inneren, d.h. mit zunehmendem Abstand vom Randpunkt und damit länger zurückliegendem Antrieb der Korrelationskoeffizient – namentlich im Falle der Einstrahlungsbedingung – etwas abnimmt, ist zu erwarten und bedarf keiner weiteren Beachtung.

 $^{^{17}}$ Würde man im folgenden statt des Flüssigwassergehaltes den Wasserdampfgehalt betrachten, erhielte man vergleichbare Resultate – solange keine Sättigung vorliegt.



Abbildung 15: Korrelation des Flüssigwassergehaltes in beiden Gebieten am Einströmrand



Abbildung 16: Korrelation des Flüssigwassergehaltes in beiden Gebieten am Ausströmrand
Im Ausströmfall gibt der zeitliche Verlauf des Korrelationskoeffizienten Aufschluß darüber, wie gut die Randbedingung in der Lage ist, einen offenen, durchströmbaren Rand zu simulieren. Die Abbildung 16 zeigt, daß die Korrelation beim Passieren des Randes durch die Welle zwar mehr oder weniger stark zurückgeht, um anschließend sofort wieder die vorherigen, hohen Werte des Korrelationskoeffizienten zu erreichen. Diese vorübergehende Abnahme nimmt allerdings nur im Falle einer Dämpfungsschicht beachtliche Werte an. Daß beide Gebiete hinterher wieder genauso hoch korreliert sind wie zuvor, liegt an der Eigenschaft des verwendeten Modells, passive Größen wie den Flüssigwassergehalt rein advektiv mit der Strömungsgeschwindigkeit zu transportieren. Eine Reflexion von numerisch bedingten Wellen kann in dieser Konfiguration also überhaupt nicht stattfinden. Aus diesem Grunde wird hier auch auf die Darstellung der Endverteilungen der betrachteten Variablen verzichtet.

7.5.3 Randbedingungen der Windkomponenten

Wie bereits in Kapitel 5 erläutert, setzt das Modell KAMM flache Konvektion voraus, was zu der Bedingung der Divergenzfreiheit des Strömungsfeldes $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ führt. Aus diesem Grund wird im weiteren Verlauf desselben Kapitels erwogen, die Geschwindigkeitskomponenten u, v und w am Rand einheitlich zu behandeln.

Im folgenden wird wieder eine Welle, diesmal bestehend aus einem Anfangsimpuls der lateralen Windkomponente, von außen bzw. von innen auf den Rand hinbewegt. Die Abbildungen 17 und 18 zeigen die dabei erhaltenen räumlichen bzw. zeitlichen Verläufe des Korrelationskoeffizienten der beiden Gebiete.

Am Einströmrand erweisen sich wiederum sämtliche Nestungsbedingungen als weitestgehend gleichwertig (Abbildung 17). Nur in der nächsten Nähe des Randpunktes zeigt sich bei Verwendung einer Mischungsschicht eine weniger ausgeprägte Korrelation.

Die nur den Randpunkt selbst betreffenden Randbedingungen erscheinen im Ausströmfall verglichen mit den eine ganze Dämpfungsschicht umfassenden als deutlich überlegen (Abbildung 18). Zwar nimmt der Korrelationskoeffizient im Falle der Mischungsschicht nach Kållberg (1977) zunächst rasch ab, verharrt dann aber im positiven Bereich bei Werten um 50 %. Den stärksten Abfall von Beginn an zeigt hier aber der Verlauf des Mischungskoeffizienten nach Lehmann (1993); bereits nach kurzer Zeit wird der Korrelationskoeffizient negativ, und die beiden Gebiete verlieren jegliche Synchronität. Etwas besser schneiden – zumindest im Anfangsbereich – die nach eigenen Berechnungen in Kapitel 4 ermittelten Werte der (von der Courantzahl abhängigen) Mischungskoeffizienten ab. Allerdings fällt auch der damit erhaltene Korrelationskoeffizient nach einiger Zeit doch deutlicher ab und wird ebenfalls negativ.



Abbildung 17: Korrelation des Horizontalwindes in beiden Gebieten am Einströmrand



Abbildung 18: Korrelation des Horizontalwindes in beiden Gebieten am Ausströmrand

7.5.4 Randbedingungen der Temperatur

Schließlich muß noch untersucht werden, welche Rand- bzw. Nestungsbedingungen sich im Hinblick auf die letzte, noch fehlende prognostische Größe, die Temperatur, am besten eignen. Dazu wird eine Temperaturwelle betrachtet, anhand derer die in den Abbildungen 19 und 20 dargestellten Verläufe des Korrelationskoeffizienten ermittelt werden.



Abbildung 19: Korrelation der Temperaturabweichungen in beiden Gebieten am Einströmrand

Gemäß Abbildung 19 bereitet die Suche nach einer optimalen Nestungsbedingung bei der Temperatur einige Probleme. Der Korrelationskoeffizient nimmt im Vergleich zu den zuvor betrachteten Variablen deutlich niedrigere Werte an. Am ehesten erfüllt noch die einfachste Nestungsbedingung, bei der lediglich am Randpunkt selbst eine Überschreibung der Werte des Nestes mit denjenigen des äußeren Antriebes erfolgt, die Forderung nach größtmöglicher Korrelation im gesamten Überschneidungsbereich der beiden Gebiete. Allerdings erreicht der Korrelationskoeffizient selbst in diesem Fall kaum Werte über 80 %.

Am Ausströmrand bietet sich ein ähnliches Bild (Abbildung 20). Erneut zeigt sich die Überlegenheit der Punkt- gegenüber den Schicht-Randbedingungen. Ob am Rand allerdings eine Extrapolation erfolgt, eine Ausstrahlungsrandbedingung zur Anwendung kommt oder aber auf eine Spezifizierung des Randes sogar völlig verzichtet wird¹⁸ (in der Abbildung als "offener Rand" bezeichnet), spielt dabei keine wesentliche Rolle. Die anhand der in Kapitel 4 berechneten eigenen

¹⁸Dies ist hier allerdings nur deshalb möglich, weil im KAMM – bedingt durch die diagnostische Berechnung des Druckfeldes – bereits implizit Randbedingungen eingebaut sind.



Abbildung 20: Korrelation der Temperaturabweichungen in beiden Gebieten am Ausströmrand

Werte der Mischungskoeffizienten (in Abhängigkeit von der Courantzahl) bewirken zunächst eine erstaunlich gute Korrelation der beiden Gebiete – bei Werten des Korrelationskoeffizienten noch deutlich über 90 % – um im weiteren Verlauf allerdings umso rascher die anfängliche Synchronisierung einzubüßen.

7.5.5 Anwendungsbeispiel: Bergüberströmung

Nachdem nun sämtliche prognostischen Variablen hinsichtlich der für diese am besten geeigneten Rand- bzw. Nestungsbedingungen getestet wurden, soll jetzt anhand eines realistischeren Anwendungsbeispiels gezeigt werden, wie die Randspezifizierungen mehrerer Größen miteinander harmonieren. Für jede der prognostischen Variablen werden dazu diejenigen Randbedingungen ausgewählt, die sich bei der isolierten Betrachtung dieser jeweiligen Größen als optimal erwiesen haben. Bei der Nestung handelt es sich dabei durchweg um die einfache Überschreibung der Randwerte, wohingegen am seitlichen Rand keinerlei besondere Vorkehrungen getroffen werden. Die vorherigen Abschnitte haben nämlich gezeigt, daß selbst am extrapolierten Rand eine Überspezifizierung der Randbedingungen gegeben ist, die mit zunehmender Simulationszeit zwangsläufig zu einer Instabilisierung des gesamten Strömungszustandes führen müssen. Lediglich im Hinblick auf die Temperatur wäre noch eine andere Festlegung des Ausströmrandes denkbar, beispielsweise in Form einer Dämpfungsschicht mit von der jeweils gerade vorherrschenden Courantzahl abhängigen Dämpfungskoeffizienten.

Die Topographie wird gemäß Abbildung 21 in Form einer 500 m mächtigen, zu



Abbildung 21: Topographie des Simulationsgebietes (η -Linien)

überströmenden Bodenwelle vorgegeben; die maximale Höhe des Integrationsgebietes beträgt 7.500 m. Zwischen diesen beiden Begrenzungsflächen an der Unterund Oberseite werden insgesamt 30 Gitterebenen eingefügt. Die Simulation führt dann zu einer Modifizierung der horizontalen (senkrecht zur Grenzfläche) und der vertikalen Geschwindigkeitskomponente sowie der Temperaturabweichung. Die Abbildungen 22–27 zeigen Vertikalschnitte der sich nach einer gewissen Zeit einstellenden Isolinien dieser prognostischen Größen. Der senkrechte Strich in den Darstellungen soll der Trennung des genesteten inneren Gebietes (links davon) vom gröberen äußeren Gebiet (rechts davon) dienen. Die Konturen des genesteten Gebietes in der linken Hälfte der Abbildungen sind durch eine breitere Linierung hervorgehoben. Die Darstellungen sollen zumindest eine qualitative Bewertung der Randbedingungen in Form eines Vergleichs der Kurvenverläufe von genestetem und äußerem Gebiet erlauben.

Die Abbildungen 22 und 23 zeigen die Isothermen im Einström- bzw. Ausströmfall. Der zu überströmende Berg liegt genau in der Mitte des Integrationsgebietes, seine Lage fällt also gerade mit der Verbindungsfläche der beiden Gebiete zusammen. Der Berg befindet sich demnach mittig im äußeren, gröberen Gebiet, hingegen direkt am Rand des inneren, genesteten Gebietes.

Die Abbildung 22 stellt den Einströmfall dar (Strömung von rechts kommend). In der rechten Hälfte der Abbildung – bei der Anströmung des Berges – wird die Strömung zum Aufsteigen gezwungen, was sich in einer großräumigen Temperaturabnahme manifestiert. Nach erfolgter Überströmung des Berges bilden sich Leewellen heraus, deren Intensität allerdings mit zunehmender Entfernung vom Hindernis wieder abnimmt. Die feineren Konturen des Nestes erlauben zwar eine



Gitterpunkte in der Horizontalen

Abbildung 22: Vergleich der Isothermen bei Einströmung

etwas höhere Auflösung des Strömungsfeldes, wodurch zusätzliche Strukturen erkennbar werden. Insgesamt gesehen ist aber eine gute Übereinstimmung mit den Isothermen des äußeren Gebietes festzustellen.

Den Ausströmfall (Strömung von links kommend) zeigt die Abbildung 23. Verlaufen die Konturen der beiden Gebiete im Nestinneren noch größtenteils kongruent zueinander, so bestehen im Randbereich dennoch merkliche Abweichungen. Dies liegt vor allem am – vom inneren Gebiet aus gesehen – fehlenden abfallenden Teil des Berges, wodurch in der Höhe eine Kompensierungstendenz der aufsteigenden Strömung hervorgerufen wird. Eigentlich erfolgt ein derartiger Ausgleich erst hinter der Bodenwelle, wie im Strömungsmuster des gröberen Gebietes erkennbar ist. Es handelt sich bei den zu beobachtenden Abweichungen also weniger um die Folge einer eventuellen Überspezifizierung des Randes als vielmehr um die direkte Konsequenz aus der Begrenzung des Integrationsgebietes.

Neben der Temperaturverteilung stellt sich auch eine charakteristische räumliche Anordnung der die Strömungsgeschwindigkeit beschreibenden Strukturen ein. In den Abbildungen 24 und 25 werden hierzu zunächst die Isotachenverläufe bei der Ein- bzw. Ausströmung wiedergegeben.

Beide Abbildungen 24 und 25 deuten auf eine größtenteils von der reibungsbedingten Abnahme der Windgeschwindigkeit zum Erdboden hin bestimmte Verteilung der Isotachen hin. Oberhalb der Grenzschicht erweist sich die Strömungsgeschwindigkeit hingegen als weitgehend homogen. Dennoch auftretende räumliche Disparitäten sind jeweils wieder in beiden Gebieten gleichermaßen beobachtbar. Hinsichtlich der Unterschiede zwischen den Resultaten bei Ein- und Ausströmung



Abbildung 23: Vergleich der Isothermen bei Ausströmung



Abbildung 24: Vergleich der Isotachen bei Einströmung



Abbildung 25: Vergleich der Isotachen bei Ausströmung

gelten die bereits im vorigen Abschnitt bei der Betrachtung des Temperaturverlaufes getroffenen Aussagen.

Abschließend zeigen die Abbildungen 26 und 27 zur Komplettierung noch speziell die Verteilung der Vertikalkomponente der Windgeschwindigkeit.

Nach Abbildung 26 ergibt sich am Einströmrand in beiden Gebieten wieder ein ähnlicher Verlauf der betrachteten Größe, auch wenn die Differenzen hier doch etwas deutlicher zutage treten als in den zuvor betrachteten Fällen.

Am Ausströmrand macht sich dagegen laut Abbildung 27 erneut die schon erwähnte Unzulänglichkeit bemerkbar, daß nämlich wegen der Lage des Berges genau am Rande des inneren Gebietes für die aufsteigende Strömung keine Möglichkeit zur Kompensierung mit einem abwärts gerichteten Bereich der Stromlinien hinter dem Berg besteht. Stattdessen schafft sich die Strömung selber einen derartigen Ausgleich, was in der direkten Nachbarschaft des Randes zu einer unrealistischen Verstärkung des Gradienten der Vertikalgeschwindigkeit führt (Ansatzweise selbst in Abbildung 26 bei der Einströmung erkennbar!). In abgeschwächter Form gilt dies – wie bereits dargelegt – auch für den Temperaturverlauf. Die zur Verwendung gelangten Randbedingungen sind demnach noch nicht der Weisheit letzter Schluß.



Abbildung 26: Vergleich der Vertikalbewegung bei Einströmung



Abbildung 27: Vergleich der Vertikalbewegung bei Ausströmung

8 Zusammenfassung

Bei Simulationsmodellen, die Wellenlösungen zulassen, stellt sich häufig das Problem unerwünschter, d.h. als Lösungen der Modellgleichungen nicht vorgesehener Reflexionen an den seitlichen Rändern, die lediglich aufgrund numerischer Effekte auftreten. Die Diskretisierung der zugrundeliegenden Differentialgleichungen muß nämlich am offenen Rand in geeigneter Weise fortgeführt werden. Dies kann zum einen durch eine schlichte Extrapolation des Randwertes geschehen. Beim Test mit einem hyperbolischen Modell erweist sich diese Methode jedoch als weniger gut geeignet, weil auf den Rand zulaufende Wellen damit fast vollständig wieder ins Innere zurückreflektiert werden. Als zweckmäßiger erweist sich die Verwendung einer Advektionsgleichung anstelle der ursprünglichen Differentialgleichung direkt am Randpunkt. Die darin einzusetzende Phasengeschwindigkeit wird stets neu aus dem Bewegungszustand der Strömung ermittelt. Nur bei nach außen, zum Rand hin gerichteter Bewegung erfolgt eine Spezifizierung des Randpunktes. Weil damit das Vordringen von numerisch bedingten, vom Rand ausgehenden Störungen ins Innere des Simulationsgebietes wirkungsvoll unterbunden wird, trägt diese Randbedingung in der Literatur auch den Namen "Ausstrahlungsbedingung". Man könnte stattdessen auch von einer "Trägheitsbedingung" sprechen, denn die Festlegung des Randwertes erfolgt zwar ähnlich wie bei der Extrapolation, allerdings nicht mit festen, sondern vielmehr mit strömungsabhängigen, gewissermaßen die "Trägheit" der Strömung (in Form der dimensionslosen Courantzahl) aufgreifenden Koeffizienten.

Neben diesen beiden, lediglich den Randpunkt selbst tangierenden Bedingungen zur Vermeidung unerwünschter Reflexionen besteht auch die Möglichkeit der Einrichtung einer mehrere Gitterpunkte umfassenden Dämpfungsschicht, innerhalb derer – wie der Name schon sagt – nach außen propagierende Wellen so stark gedämpft werden, daß nur ein geringer Bruchteil davon wieder ins Innere zurückgelangen kann. Ähnlich wie bei den "Punkt-Randbedingungen" können auch hier – wie in der vorliegenden Arbeit dargelegt wird – zwei miteinander konkurrierende Methoden zur Anwendung gelangen. Es können dabei nämlich sowohl fest vorgegebene Dämpfungskoeffizienten als auch strömungsabhängige (wiederum als Funktion der Courantzahl vorliegend) benutzt werden. Diese "Schicht-Randbedingungen" erweisen sich am offenen Rand vor allem der Ausstrahlung gegenüber als unterlegen; ihre Stärke besteht in der Verwendbarkeit im Bereich der Ränder genesteter Gebiete, wo gleichzeitig die Wirksamkeit eines äußeren Antriebes zu gewährleisten ist.

Die analytische Untersuchung zeigt unter anderem, daß die Reflektivität einer Welle am Rand weniger von deren Wellenlänge (in Form der Breite eines Wellenpaketes) als vielmehr in erster Linie von der momentanen Courantzahl der Strömung abhängt. Dieses Ergebnis, das auch am numerischen Modell seine Bestätigung findet, ist doch einigermaßen erstaunlich, zumal im Falle einer Dämpfungsschicht. Der Courantzahl kommt demnach eine elementare Bedeutung zu.

Auch wenn der geeigneten Behandlung offener Ränder wegen der damit verbundenen Schwierigkeiten eine größere Aufmerksamkeit gebührt, liegt das Hauptinteresse dieser Arbeit doch in der Untersuchung der durchströmbaren Verbindung ineinander genesteter Gebiete. Bei der Nestung werden im allgemeinen zwei (oder auch mehrere) Gitternetze mit einer unterschiedlich dichten Anordnung der Gitterpunkte, also verschiedenen Maschenweiten, überlagert. Die Überlappung betrifft in der Regel ein zentrales Gebiet, wo folglich eine bessere räumliche Auflösung im Vergleich zu den Randbereichen des untersuchten Gebietes ermöglicht wird. Dadurch lassen sich in der Strömung auch feinskaligere Strukturen noch darstellen, ohne dabei zwangsläufig das zur Verfügung stehende Simulationsgebiet allzusehr einzuschränken. In der Peripherie des Modellgebietes kann hingegen auf eine anhaltend hohe Gitterpunktdichte – zugunsten der Erweiterung des möglichen Einflußbereiches der Strömung im zentralen Bereich – ohne größere Einbußen im Hinblick auf die Genauigkeit der Lösungen verzichtet werden. Die Koppelung der beiden Gebiete hat dann in erster Linie vor dem Hintergrund der Sicherstellung eines solchen äußeren Antriebes zu erfolgen. Die Nestungsbedingungen haben freilich noch eine zweite Aufgabe: Die (in Wirklichkeit ja nicht vorhandene) künstliche Begrenzung zwischen den beiden Gitternetzen kann die Ursache von Störungen sein, die von dieser, zugleich den Rand des inneren Gebietes verkörpernden Verbindungsfläche hervorgerufen werden. Es ist demnach gleichermaßen dafür zu sorgen, daß der seitliche, offene Rand des inneren Gitternetzes keinen Anlaß zu derartigen unerwünschten Effekten bietet. Der Behandlung offener Ränder kommt also in jedem Falle eine grundlegende Rolle zu.

Als spezielle Nestungsbedingungen bieten sich sinngemäße Erweiterungen der entsprechenden Formulierungen des offenen Randes an. Aus der dort praktizierten Extrapolation wird dann eine Übernahme des Randwertes vom antreibenden Gebiet. Entsprechend läßt sich die Ausstrahlungsbedingung zu einer "Einstrahlungsbedingung" erweitern, und aus der Dämpfungsschicht erwächst bedingt durch die allmähliche Angleichung der Werte des inneren Gitters an diejenigen des äußeren eine Anpassungsschicht; im Zusammenwirken mit der am offenen Rand angreifenden Dämpfungsschicht erweist sich die Bezeichnung "Mischungsschicht" als treffender. – Die Nestungsbedingungen rufen in der praktischen Ausführung generell weniger Probleme hervor als ihre Pendants am offenen Rand, was eine bevorzugte Behandlung der letzteren als gerechtfertigt erscheinen läßt.

Weil in der Literatur normalerweise einfache, hyperbolische Flachwassermodelle zur Verifizierung der vorgeschlagenen Randbedingungen benutzt werden, wird deshalb hier zu Vergleichszwecken ebenfalls davon Gebrauch gemacht. Dies soll in erster Linie der Gegenüberstellung von *hyperbolischen* und *elliptischen* Modellen dienen. Das verwendete komplexere meteorologische Modell KAMM kann nämlich der elliptischen Kategorie zugeordnet werden. Es zeigt sich, daß die analytisch ermittelten Resultate zwar in durchaus guter Übereinstimmung mit dem hyperbolischen Modell stehen. Allerdings läßt – entgegen der Erwartung – die Übertragbarkeit der Ergebnisse auf den elliptischen Fall doch sehr zu wünschen übrig. Es muß nämlich ernüchternd festgestellt werden, daß beim KAMM in der Regel sogar bessere Resultate erzielt werden können, wenn von einer Spezifizierung der prognostischen Variablen an den seitlichen Rändern vollständig abgesehen wird. Dies ist allerdings nur deshalb möglich, weil – bedingt durch die diagnostische Berechnung der Druckverteilung – im KAMM bereits implizit Randbedingungen festgelegt sind. Im Hinblick auf die Nestung erweist sich die einfachste Möglichkeit der schlichten Übertragung des Randwertes vom äußeren Gebiet auf den entsprechenden Punkt des feineren Gitters zugleich als die am besten geeignete. Das eventuelle Auftreten von sehr kurzwelligen, sich rasch vom Rand aus in das Innere des Simulationsgebietes ausbreitenden Störungen läßt sich weniger gut im Rahmen der Behandlung der Randbedingungen in den Griff bekommen; dazu sind spezielle Filter eher tauglich.

9 Literaturverzeichnis

- Adrian, G. und Fiedler, F. (1991): Simulation of Unstationary Wind and Temperature Fields over Complex Terrain and Comparison with Observations, Contrib. Atmos. Phys. 64, 27–48
- Alapaty, K., Mathur, R. und Odman, T. (1998): Intercomparison of Spatial Interpolation Schemes for Use in Nested Grid Models, Mon. Wea. Rev. 126, 243–255
- Anthes, R. A., Kuo, Y.-H., Hsie, E.-Y., Low-Nam, S. und Bettge, T. W. (1989): Estimation of Skill and Uncertainty in Regional Numerical Models, Quart. J. Roy. Meteor. Soc. **115**, 763–806
- Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A. (1991): Taschenbuch der Mathematik, Stuttgart/Leipzig
- Davies, H. C. (1976): A Lateral Boundary Formulation for Multi-level Prediction Models, Quart. J. Roy. Meteor. Soc. 102, 405–418
- Davies, H. C. und Turner, R. E. (1977): Updating Prediction Models by Dynamical Relaxation: An Examination of the Technique, Quart. J. Roy. Meteor. Soc. 103, 225–245
- Davies, H. C. (1983): Limitations of Some Common Lateral Boundary Schemes Used in Regional NWP Models, Mon. Wea. Rev. 111, 1002–1012
- Durran, D. L., Yang, M.-J., Slinn, D. N. und Brown, R. G. (1993): Toward More Accurate Wave-Permeable Boundary Conditions, Mon. Wea. Rev. 121, 604–620
- Hedley, M. und Yau, M. K. (1988): Radiation Boundary Conditions in Numerical Modelling, Mon. Wea. Rev. 116, 1721–1736
- Hedstrom, G. W. (1979): Nonreflecting Boundary Conditions for Nonlinear Hyperbolic Systems, J. Comput. Phys. 30, 222–237
- Israeli, M. und Orszag, S. A. (1981): Approximation of Radiation Boundary Conditions, J. Comput. Phys. 41, 115–135
- Kållberg, P. (1977): Test of a Lateral Boundary Relaxation Scheme in a Barotropic Model, ECMWF, Research Department, Internal Report **3**, Bracknell
- Kantha, L. H., Blumberg, A. F. und Mellor, G. L. (1990): Computing Phase Speeds at Open Boundary, J. Hydr. Eng. 116, 592–597

- Kurihara, Y., Kerr, C. L. und Bender, M. A. (1989): An Improved Numerical Scheme to Treat the Open Lateral Boundary of a Regional Model, Mon. Wea. Rev. 117, 2714–2722
- Lehmann, R. (1993): On the Choice of Relaxation Coefficients for Davies' Lateral Boundary Scheme for Regional Weather Prediction Models, Meteor. Atmos. Phys. 52, 1–14
- Mesinger, F. (1997): Dynamics of Limited-area Models: Formulation and Numerical Methods, Meteor. Atmos. Phys. 63, 3–14
- Miller, M. J. und Thorpe, A. J. (1981): Radiation Conditions for the Lateral Boundaries of Limited-Area Numerical Models, Quart. J. Roy. Meteor. Soc. 107, 615–628
- Orlanski, I. (1976): A Simple Boundary Condition for Unbounded Hyperbolic Flows, J. Comput. Phys. **21**, 251–269
- Paschen, W. (1980): Das Nestling-Problem in meteorologischen Modellen (Probleme sprunghafter Gitternetz-Verfeinerung), Diss. Hamburg
- Pearson, R. A. (1974): Consistent Boundary Conditions for Numerical Models of Systems that Admit Dispersive Waves, J. Atmos. Sci. 31, 1481–1489
- Raymond, W. H. und Kuo, H. L. (1984): A Radiation Boundary Condition for Multi-Dimensional Flows, Quart. J. Roy. Meteor. Soc. 110, 535–551
- Shapiro, R. (1978): Interpolation of Data Between Uniform Grids of Differing Lengths, Mon. Wea. Rev. 106, 738–745
- Staniforth, A. (1997): Regional Modeling: A Theoretical Discussion, Meteor. Atmos. Phys. 63, 15–29
- Williamson, D. L. und Browning, G. L. (1974): Formulation of the Lateral Boundary Conditions for the NCAR Limited Area Model, J. Appl. Meteor. 13, 8–16

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig verfaßt und nur die angegebenen Hilfsmittel verwendet zu haben.

Außerdem erkläre ich mich damit einverstanden, daß diese Arbeit in der Bibliothek ausgestellt und vervielfältigt werden darf.