

Numerische und geometrische Aspekte der Energie-Wirbel-Theorie

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades des
Doktors der Naturwissenschaften
am Fachbereich Geowissenschaften
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Matthias Sommer

im Januar 2010

Gutachter

PD Dr. Peter Névir

Prof. Dr. Sebastian Reich

Tag der Disputation: 31. Mai 2010

Inhaltsverzeichnis

I	Einleitung und Stand der Forschung	1
1	Einleitung	2
1.1	Problemstellung und Motivation	2
1.2	Gliederung der Arbeit	6
2	Die Flachwassergleichungen	8
2.1	Herleitung der Flachwassergleichungen	8
2.1.1	Skalare Form der Flachwassergleichungen	11
2.1.2	Balancen des Flachwassermodells	13
2.2	Die Flachwassergleichungen in Hamilton-Darstellung	13
2.2.1	Geschwindigkeitsvariablen	14
2.2.2	Abgeleitete Variablen	14
2.3	Die n -Schicht-Flachwassergleichungen	17
3	Die Nambu-Darstellung	20
3.1	Definition und Eigenschaften	21
3.2	Tensor- und Operatorform der Nambu-Darstellung	25
3.2.1	Tensorielle Form der Nambu-Darstellung	25
3.2.2	Nambu-Darstellung für Feldgleichungen	25
4	Energie-Wirbel-Theorie	27
4.1	Die barotrope Vorticitygleichung in Nambu-Darstellung	27
4.2	Die Flachwassergleichungen in Nambu-Darstellung	29
5	Geometrische Integration	33
5.1	Konservative räumliche Diskretisierungen	34
5.2	Diskretisierung auf Basis der Hamilton-Darstellung	35
5.3	Diskretisierung auf Basis der Nambu-Darstellung	35
6	Das ICON-Modell	38
6.1	Das ICON-Gitter	38
6.1.1	Eine gitterinduzierte Instabilität	39
6.1.2	Mittelungen auf dem ICON-Gitter	40
6.2	Räumliche Operatoren und Bewegungsgleichungen	41

II	Ergebnisse	43
7	Nambu-Diskretisierung der Flachwassergleichungen auf einem versetzten, geodätischen Gitter	44
7.1	Methodik	44
7.2	Herleitung der Nambu-Semi-Diskretisierung auf dem ICON-Gitter	46
7.2.1	Funktionalableitungen auf dem ICON-Gitter	47
7.2.2	Nambu-Klammern auf dem ICON-Gitter	48
7.2.3	Resultierende Operatoren und Bewegungsgleichungen	51
7.2.4	Vorhersageprozess	52
7.3	Flussform der potentiellen Enstrophie	53
7.4	Numerische Experimente mit dem Nambu-Schema	55
7.4.1	Rossby-Welle	55
7.4.2	Erhaltungs- und Stabilitätseigenschaften	55
7.4.3	Spektralanalysen	59
7.4.4	Die Erhaltung der Wirbel-Casimire	60
8	Nambu-Formen in der Hydro-Thermodynamik	65
8.1	Das quasigeostrophische Zweischicht-Modell	65
8.2	Das n -Schicht-Flachwassermodell	66
8.3	Das hydrostatische Modell	68
8.4	Die resonante Wellentriade	71
8.5	Das Lorenz'86-System	73
9	Geometrische und algebraische Eigenschaften der Nambu-Form	77
9.1	Lokale und globale Antisymmetrien	77
9.2	Die Lie-Algebra von Nambu-Systemen	81
9.3	Das Phasenraumvolumen	87
9.3.1	Das Phasenraumvolumen von allgemeinen dynamischen Systemen	88
9.3.2	Das Phasenraumvolumen von Poisson- und Nambu-Systemen . . .	94
9.4	Das Phasenraumvolumen von Diskretisierungen	98
9.4.1	Volumenerhaltung und Zeit-Reversibilität unter räumlichen Diskretisierungen	99
9.4.2	Volumenerhaltung und Zeit-Reversibilität unter zeitlichen Diskretisierungen	100
9.4.3	Volumenerhaltung und Lyapunov-Exponenten	102
9.4.4	Experimente mit räumlichen Diskretisierungsschemen	103
9.4.5	Experimente mit zeitlichen Diskretisierungsschemen	105
10	Zusammenfassung, Interpretation und Ausblick	108
10.1	Zusammenfassung und Interpretation	108
10.2	Ausblick	110

III	Anhänge	113
A	Hamiltonsche Mechanik	114
A.1	Systeme auf symplektischen Mannigfaltigkeiten	115
A.2	Systeme auf Poisson-Mannigfaltigkeiten	116
A.2.1	Zusammenhang zwischen algebraischer und geometrischer Darstellung	119
A.2.2	Lie-Poisson-Mannigfaltigkeiten	119
B	Lie-Algebren und Funktionalableitungen	122
B.1	Lie-Algebren	122
B.2	Funktionalableitungen	123
B.2.1	Diskretisierung der Funktionalableitung	124
B.2.2	Kettenregel für Funktionalableitungen	124
C	Helmholtz-Theorem und Potentialrekonstruktion	126
C.1	Das zweidimensionale Helmholtz-Theorem	126
C.1.1	Zusammenhang mit der Kettenregel der Funktionalableitung . . .	127
C.2	Die Potentialrekonstruktion	128
	Symbolverzeichnis	130
	Literaturverzeichnis	132

Abbildungsverzeichnis

1.1	Themenübersicht	4
1.2	Numerische Modellierung	5
2.1	Das Flachwassermodell	11
2.2	Helmholtz-Zerlegung	16
2.3	Das n -Schichtmodell	17
3.1	Hamilton-Systeme	20
6.1	Das ICON-Gitter und sein lokales Stencil	39
6.2	Galewsky-Test	40
7.1	Übersicht Nambu-Diskretisierung für die Flachwassergleichungen	45
7.2	Kürzung auf dem Gitter	49
7.3	Höhenfeld für Rossby-Welle	56
7.4	Enstrophiebilanz	56
7.5	Enstrophiebilanzen gegen Zeitschrittgröße	57
7.6	Energiebilanz gegen Viskositätskoeffizient	58
7.7	Energiebilanz	58
7.8	Energie- und Enstrophie- Bilanzen mit der impliziten Mittelpunkregel	59
7.9	Spektrale Energieverteilungen	60
7.10	Casimirbilanzen	61
7.11	Casimirbilanzen	61
8.1	Resonante Wellentriade	71
9.1	Eigenwerte der Killing-Form zweier Diskretisierungen der Vorticitygleichung	84
9.2	Die Lie-Algebra von Nambu-Systemen	86
9.3	Ensembles-Vorhersage	87
9.4	Trajektorien im Phasenraum	93
9.5	Volumenbilanz des Flachwassermodells	94
9.6	Längentendenz gegen Gitterkonstante	104
9.7	Mittlere Längentendenz für die implizite Mittelpunkregel	105
9.8	Mittlere Längentendenz für nichtreversible Zeitintegratoren	106
A.1	Hamilton-Systeme	115

Tabellenverzeichnis

2.1	Skalare Form der Flachwassergleichungen	12
3.1	Vergleich zwischen Jacobi- und Takhtajan-Identität	24
4.1	Kontinuierliche und diskrete atmosphärendynamische Systeme in Nambu-Form	28
4.2	Beiträge der einzelnen Teilklammern	32
5.1	Übersicht Nambu-Diskretisierung	36
6.1	Gitterbezeichnungen	39
6.2	Lokale Größen auf dem ICON-Gitter	41
7.1	Zusätzliche Größen für die Nambu-Diskretisierung	46
7.2	Casimir-Erhaltung und individuelle PV-Erhaltung	63
8.1	Dimensionsanalyse der Lorenz-Systeme	76
9.1	Antisymmetrien der zwei- und dreidimensionalen, inkompressiblen Fluid- dynamik	78
9.2	Zwei Hamilton-Darstellungen des Lotka-Volterra-Systems	92
9.3	Reversibilität und Volumenerhaltung	93
9.4	Volumenerhaltung in linearen und nichtlinearen Systemen	96
9.5	Volumenerhaltung von regulären und singulären Hamilton-Systemen	97
9.6	Symmetrie und Antisymmetrie	98
A.1	Jacobi- und Leibnizidentität	117
A.2	Lie-Poisson-Reduktion	121

Zusammenfassung Das Thema der vorliegenden Arbeit ist die Energie-Wirbel-Theorie, die Darstellung verschiedener atmosphärendynamischer Gleichungssysteme in Nambu-Form. Letztere misst als Verallgemeinerung der Hamilton-Form den Erhaltungseigenschaften eines Systems besonderen Wert zu. Basierend auf dieser Darstellung wird für die Flachwassergleichungen ein numerisches Diskretisierungsschema auf einem modernen, unstrukturierten Gitter entwickelt, welches Erhaltungsgesetzen für die Energie und die potentielle Enstrophie genügt. Anhand numerischer Experimente werden verschiedene Eigenschaften des so definierten Schemas untersucht. Außerdem werden die geometrischen und algebraischen Merkmale der Energie-Wirbel-Theorie sowie der damit definierten Diskretisierungsschemen diskutiert.

Summary The focus of this thesis is the Energy-Vorticity-Theory, the representation of various atmospheric dynamical equations of motion in Nambu form. As a generalization of Hamiltonian mechanics, the Nambu formalism allocates particular significance to the conservation properties of a system. Based on this representation, a numerical discretization scheme for the shallow-water equations on a ‘state of the art’ unstructured grid which complies with conservation laws for energy and potential enstrophy is developed. Various properties of this scheme are analyzed by means of numerical experiments. Furthermore, the geometric and algebraic traits of the energy-vorticity theory and the associated discretization schemes are discussed.

Teil I

Einleitung und Stand der Forschung

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Problemstellung und Motivation

Seit rund hundert Jahren werden Methoden der numerischen Mathematik auf die Meteorologie angewendet: Ab 1911 beschäftigte sich der norwegische Meteorologe Lewis Fry Richardson mit der Idee, die Atmosphärendynamik durch numerische Lösungen von partiellen Differentialgleichungen zu beschreiben und vorherzusagen. Obschon der ursprüngliche Versuch von Richardson (1922) noch keine praktisch brauchbaren Resultate erbrachte, wurde die Idee weiterverfolgt und schließlich mit einem einfacheren physikalischen Modell sowie besseren numerischen Methoden von Charney et al. (1950) die erste erfolgreiche numerische Wettervorhersage durchgeführt. Seither hat eine weitreichende Entwicklung auf dem Gebiet der numerischen Wettervorhersage stattgefunden, die vor allem auf die Fortschritte in der digitalen Informationsverarbeitung und im meteorologischen Messwesen sowie auf verbesserte numerische Methoden zurückzuführen ist. Damit haben sich auch die Ziele grundlegend verändert: Während Richardson noch davon träumte, „schneller zu rechnen als das Wetter voranschreitet“, sind heute Klimaprognosen über Jahrtausende hinweg in greifbare Nähe gerückt.

Parallel zu dieser anwendungsorientierten Entwicklung verlief die Theoriebildung in der Meteorologie. Während die klassischen Bewegungsgesetze für Fluide bereits seit den Arbeiten von Euler (1757) sowie Navier und Stokes bekannt waren, wurde erst Anfang des vergangenen Jahrhunderts damit begonnen, diese auf konkrete atmosphärendynamische Probleme anzuwenden (Bjerknes, 1904; Exner, 1908). Die durch genauere und besser vernetzte Messungen möglich gewordene Beobachtung von typischen Bewegungsmustern der Atmosphäre konnten so durch eine systematische Analyse der zugehörigen Bewegungsgleichungen beschrieben und analysiert werden. Besonders erwähnenswert im Bezug auf die hier vorliegende Arbeit ist die Entdeckung von Erhaltungsgesetzen. Während Energie-, Impuls-, Masse- und Entropieerhaltung den Ausgangspunkt zur Herleitung der hydro-thermodynamischen Bewegungsgleichungen bilden, wurden andere Erhaltungsgrößen erst später daraus abgeleitet. Ohne Bezug auf die Atmosphärendynamik waren für inkompressible Fluide schon von Helmholtz und Kelvin Wirbelerhaltungsgesetze aufgestellt worden (Helmholtz, 1858). Mit Blick auf die meteorologische Anwendung

gelang dies für die vollständigen, nichthydrostatischen Gleichungen mit der Arbeit von Ertel (1942).

Ein weiteres, für diese Arbeit relevantes Konzept, ist die Hamiltonsche Darstellung von Differentialgleichungen. Diese Methode der theoretischen Physik hat das Verständnis verschiedenster Systeme wesentlich geprägt (z. B. Festkörperphysik, Moleküldynamik und Quantentheorie). In Lagrangescher, d. h. partikelorientierter Beschreibung der Fluidodynamik folgt die Hamiltondarstellung direkt aus den entsprechenden Variationsprinzipien. In Eulerscher, also ortsfester Darstellung ergibt sich bei Ergänzung des Systems durch prognostische Clebsch-Potentiale ebenso eine Hamilton-Darstellung (Clebsch, 1857; Ertel, 1939; Davydov, 1949). Die Teilchenumordnungssymmetrie kann dabei als zusätzliche Nebenbedingung (sog. Lin-Constraints) interpretiert werden (Lin, 1963). Ohne die Verwendung der Clebsch-Potentiale ergibt sich ein singuläres System: Der Teilchenumordnungssymmetrie entsprechen dann gemäß dem Noetherschen Theorem Wirbelerhaltungsgrößen, die als Casimire unter beliebigen Transformationen des Phasenraums erhalten sind. Durch die Reduktion der vollen Lagrangeschen auf die reduzierte, ortsfeste Beschreibung ergibt sich ein Hamiltonsches System auf einer Poisson-Mannigfaltigkeit (Ebin und Marsden, 1970; Marsden und Weinstein, 1974; Morrison und Greene, 1980). Die Hamiltonsche Darstellung von Systemen verschiedenster Art wurde auch in der numerischen Mathematik aufgegriffen. Allgemein werden Diskretisierungsschemen, die auf der Hamiltonschen Darstellung oder auf Variationsprinzipien beruhen, unter dem Stichwort ‚geometrische Integration‘ zusammengefasst.

Eine aktuelle Entwicklung in der theoretischen Meteorologie ist schließlich die Ausarbeitung der Energie-Wirbel-Theorie (Névir und Blender, 1993; Névir, 1998; Salmon, 2005; Névir und Sommer, 2009). Deren Grundkonzept ist die Nambu-Darstellung von atmosphärendynamischen Bewegungsgleichungen und damit die Formulierung und Klassifizierung verschiedener Atmosphärenmodelle hinsichtlich ihrer Erhaltungseigenschaften. Dabei wird die von Nambu (1973) eingeführte Verallgemeinerung der Hamiltonmechanik eingesetzt. So können neben der Energie auch andere Erhaltungseigenschaften als konstituierende (d. h. die Bewegungsgleichung definierende) Größen auftreten. In der Energie-Wirbel-Theorie ergeben sich jeweils die Gesamtenergie und eine systemabhängige Wirbelgröße als konstituierende Erhaltungsgrößen. Daraus ergibt sich auch eine praktische Anwendung: Im Zug der Entwicklung von geometrischen Konzepten für die numerische Modellierung wurde von Salmon (2005, 2007) die Verwendung der Nambu-Darstellung zur räumlichen Diskretisierung von fluidodynamischen Systemen vorgeschlagen. Dieses Konzept wird im Folgenden als ‚Nambu-Diskretisierung‘ bezeichnet. Deren exemplarische Anwendung auf die meteorologischen Flachwassergleichungen ist das Hauptthema der vorliegenden Arbeit.

Der Austausch von Methoden und Ideen zwischen numerischer Mathematik, theoretischer Physik und Meteorologie wird in Abb. 1.1 vereinfacht zusammengefasst. Die Nambu-Mechanik ist ein spezielles Teilgebiet der theoretischen Physik, entsprechend stellt Abbildung 1.1 (b) einen Ausschnitt von 1.1 (a) dar. Das Hauptthema dieser Arbeit, die Anwendung der Nambu-Diskretisierung auf ein meteorologisches Gleichungssystem, ist rot markiert.

Die Motivation hinter der Verwendung von Methoden der geometrischen Integra-

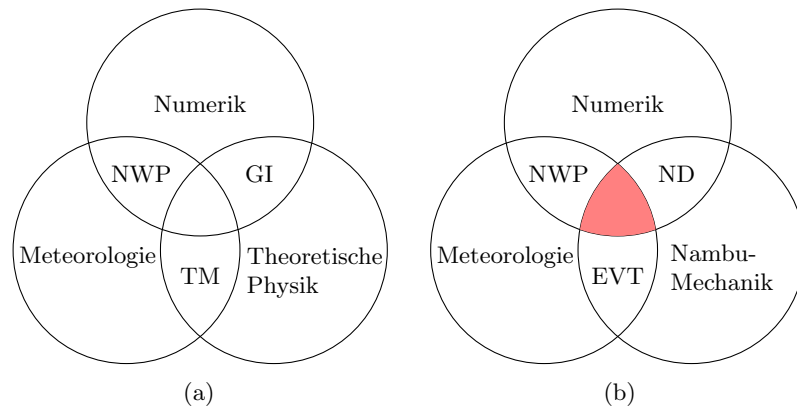


Abbildung 1.1: Themenübersicht. NWP: Numerische Wettervorhersage. TM Theoretische Meteorologie. GI: Geometrische Integration. EVT: Energie-Wirbel-Theorie. ND: Nambu-Diskretisierung.

tion sind zu einem wesentlichen Punkt die Erhaltungseigenschaften, deren Rolle hier kurz erläutert werden soll. Das Gesamtsystem Atmosphäre umfasst sowohl konservative (z. B. Advektion, Gravitation) als auch dissipative (z. B. turbulente und viskose Reibung) und antreibende Prozesse (z. B. Strahlung und diabatische Prozesse). Bei der Modellierung dieses Gesamtsystems können wegen der beschränkten Rechenkapazitäten nicht alle Prozesse genau dargestellt werden, deshalb wird ein Teil der Dynamik durch Parametrisierungen approximiert. Ein Beispiel hierfür ist die turbulente Reibung. Sie parametrisiert ähnlich einem Reservoir den Einfluss der Subgrid-Skala auf die aufgelöste Skala. Gängige Diskretisierungsverfahren für den konservativen Kern weisen oft Unzulänglichkeiten bezüglich der Erhaltungseigenschaften auf. Sehr deutlich wird dies am Beispiel der inkompressiblen, zweidimensionalen Dynamik. Dort gibt es einen engen Zusammenhang zwischen einer unzureichenden numerischen Umsetzung der Enstrophieerhaltung und einem unnatürlich starken Energiefluss zum unteren Rand der aufgelösten Skala hin. Dies führt über kurz oder lang zur sogenannten nichtlinearen numerischen Instabilität. Ein möglicher Ausweg ist die Entfernung der Energie auf der kleinsten Skala aus dem System mittels Dissipation. Problematisch an diesem Vorgehen ist, dass damit die Parametrisierung nicht mehr nach den auf dieser Skala tatsächlich stattfindenden Prozessen modelliert wird, sondern durch numerische Notwendigkeiten vorgegeben ist. Eine elegante Lösung zur Behebung der nichtlinearen Instabilität ist die Verwendung von konservativen Schemen, wie zum Beispiel dem Arakawa (1966)-Schema oder dem in dieser Arbeit hergeleiteten. Es geht bei diesen Ansätzen deshalb nicht darum, die dissipativen Prozesse zu vernachlässigen oder Modelle und Theorien zu bearbeiten, welche jene ausschließen. Vielmehr soll versucht werden, den konservativen Anteil des Gesamtsystems auf eine Weise zu behandeln, welche Voraussetzung für eine konsistente Modellierung auch des dissipativen Teilsystems ist. Dabei liegt der Schwerpunkt dieser Arbeit hauptsächlich auf der Entwicklung von konservativen räumlichen und weniger den zeit-

lichen Diskretisierungsschemen. Abb. 1.2 zeigt schematisch die Schritte der numerischen Modellierung bis zur Simulation eines Modells sowie den Punkt (rot markiert), an dem diese Arbeit ansetzt.

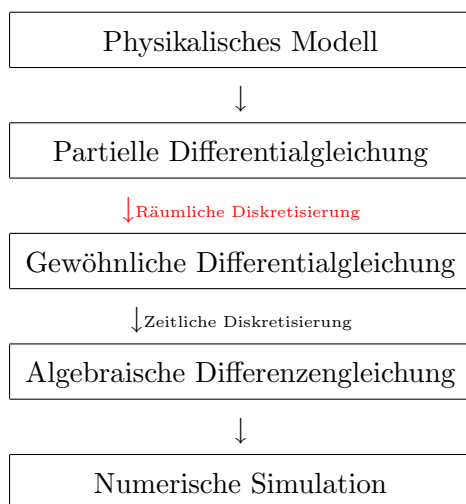


Abbildung 1.2: Numerische Modellierung

Abgesehen von dieser praktischen Anwendung werden im Rahmen einer weiteren Verallgemeinerung der Energie-Wirbel-Theorie zusätzliche Beispiele für Nambu-Formen in der Atmosphärendynamik genannt. Im Wesentlichen ist das die Verallgemeinerung der bereits existierenden Nambu-Darstellungen für die quasigeostrophische Dynamik und für das Flachwassermodell auf Systeme mit mehreren Schichten sowie das kontinuierlich geschichtete, hydrostatische Modell.

Schließlich werden die algebraischen und geometrischen Eigenschaften der Nambu-Darstellung, wie sie in der Energie-Wirbel-Theorie verwendet wird, untersucht. Neben der generellen Frage nach der Voraussetzung für die Existenz einer Nambu-Darstellung interessiert im Fall der Fluidodynamik unter anderem die Beziehung zwischen der Dimension des Gebietes, auf dem sich die Dynamik abspielt, und den für die Nambu-Darstellung ‚günstigsten‘ Variablen. Dies ist auch von praktischer Relevanz, da die Verwendung von Geschwindigkeitsvariablen wegen des Wegfalls der Notwendigkeit einer Potentialrekonstruktion effizienter ist als die Verwendung von abgeleiteten Variablen. Die algebraische Interpretation der Hamilton-Mechanik kann in gewissem Umfang auch auf die Nambu-Mechanik verallgemeinert werden. Insbesondere gibt es eine enge Beziehung von Nambu-Systemen zu halbeinfachen Lie-Algebren, die sich in praktischen Anwendungen jedoch nicht zwingenderweise widerspiegelt. Die geometrische Beschreibung von gewöhnlichen sowie partiellen Differentialgleichungen bietet sich insbesondere für die qualitative Analyse der Stabilitätseigenschaften an. Das Hamilton-Prinzip, interpretiert als Geodätengleichung, definiert auf dem Phasenraum durch die kinetische Energie eine Metrik und damit einen Krümmungsbegriff. Aus der Bemerkung, dass fluiddynamische Phasenräume typischerweise negative Krümmung aufweisen, er-

gibt sich eine anschauliche, geometrische Erklärung für die prinzipiellen Schwierigkeiten der numerischen Wettervorhersage (Arnold und Khesin, 1998). Für die geometrische Beschreibung der Nambu-Mechanik bietet sich hier die Liouville-Gleichung beziehungsweise das Liouville-Theorem als Ausgangspunkt der Idee von Nambu an. Die Liouville-Gleichung kann als Kontinuitätsgleichung für die Phasenraumdichte auch durch das Volumen eines im Phasenraum mitbewegten Gebietes ausgedrückt werden. Für symplektische Hamilton-Systeme ist dieses Volumen erhalten, eine Eigenschaft, die unter passenden Annahmen auch auf Poisson-Systeme übertragen werden kann. Wegen der konzeptionellen Nähe der Liouville-Gleichung zu Ensembles-Vorhersage-Methoden ist auch die Frage nach einer geeigneten numerischen Umsetzung von Interesse.

Einige der behandelten Fragen werden experimentell beantwortet. Dabei wird als Ausgangspunkt das sogenannte ICON-Modell¹, beziehungsweise dessen Prototyp ICOSWP² verwendet. Beide Modelle sind Teil des ICON-Projektes des Max-Planck-Institutes für Meteorologie sowie des deutschen Wetterdienstes mit dem Ziel der Entwicklung eines kombinierten Wetter- und Klimavorhersagemodells. Das ICOSWP-Modell der Flachwassergleichungen wurde als wesentlicher Teil der vorliegenden Arbeit um eine Implementierung der Nambu-Diskretisierung erweitert. Auf diese Weise sind Vergleichsexperimente zwischen dem ursprünglichen ICON-Flachwassermodell und dem modifizierten Modell möglich.

1.2 Gliederung der Arbeit

Die wichtigsten Themen aus Abb. 1.1 werden als Stand der Forschung in folgenden Kapiteln aufgegriffen: Das Flachwassersystem als einfaches Modell der Meteorologie in Kapitel 2, die Nambu-Darstellung in Kapitel 3, die Energie-Wirbel-Theorie in Kapitel 4, Methoden der geometrischen Integration inklusive Nambu-Diskretisierung in Kapitel 5 und das ICON-Modell in Kapitel 6. Davon ausgehend sollen in dieser Arbeit folgende Fragen diskutiert werden:

- Lässt sich die Energie-Wirbel-Theorie zur Konstruktion von konservativen Schemen auf einem modernen Gitter anwenden? (Kapitel 7)
- Welche Eigenschaften weisen so konstruierte Schemen auf und entsprechen sie den Erwartungen? (Kapitel 7)
- Für welche anderen atmosphärendynamischen Systeme gibt es Nambu-Darstellungen? (Kapitel 8)
- Was sind die grundlegenden algebraischen und geometrischen Eigenschaften der Nambu-Darstellung, so wie sie in der Energie-Wirbel-Theorie benutzt wird? (Kapitel 9)

¹**I**cosahedral **N**onhydrostatic

²**I**cosahedral **S**hallow **W**ater **P**rototype

- Was lässt sich über die Phasenraumvolumenerhaltung der Nambu-Diskretisierung sagen? (Kapitel 9)

Einige der Resultate sind im Rahmen dieser Arbeit als Teile von Artikeln veröffentlicht worden:

- Die Konstruktion von konservativen Schemen auf dem ICON-Gitter in Sommer und Névir (2009).
- Die Erweiterung der Energie-Wirbel-Theorie um Schichtmodelle und das hydrostatische Modell in Névir und Sommer (2009).
- Ein Vergleich der Nambu-Diskretisierung mit Hamiltonschen Teilchenmethoden in Shin et al. (2009).
- Die Volumenerhaltung von Diskretisierungen in Sommer und Reich (2010).

Kapitel 2

Die Flachwassergleichungen

Verglichen mit anderen Modellen der Atmosphärendynamik zeichnet sich das Flachwassermodell durch das Fehlen des thermodynamischen Freiheitsgrades aus. Erfasst werden dagegen die nichtlinearen Eigenschaften der Fluidodynamik unter Einfluss der Gravitation. Konkret beschreibt es die Strömung einer inkompressiblen Flüssigkeit beziehungsweise eines inkompressiblen, hydrostatisch geschichteten Gases auf der rotierenden Erde. Die charakteristische horizontale Längenskala ist dabei weitaus größer als die vertikale Skala. Es wird hingegen keine Näherung bezüglich des geostrophischen Gleichgewichts, wie z. B. beim quasigeostrophischen Modell angenommen. Die Flachwassergleichungen werden als Testfall für numerische Modelle verwendet (Williamson et al., 1992), da sie trotz ihrer ‚Einfachheit‘ doch wesentliche Merkmale der vollständigen, primitiven Dynamik aufweisen: Dies ist neben der Nichtlinearität vor allem die Tatsache, dass Wellenphänomene auf verschiedenen Zeitskalen auftreten, konkret sind das die ‚langsamen‘ Rossby- und die ‚schnellen‘ Schwerewellen.

2.1 Herleitung der Flachwassergleichungen

Ausgangspunkt für die Herleitung der Flachwassergleichungen ist das prognostische Gleichungssystem für die nichthydrostatische, barokline, adiabatische und reibungsfreie Atmosphäre auf der rotierenden Erde: Die Bewegungsgleichung für den dreidimensionalen Wind, die Masse-Kontinuitätsgleichung sowie die hydrodynamische Form des ersten thermodynamischen Hauptsatzes:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - 2\boldsymbol{\omega}_E \times \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \nabla p - \nabla \Phi \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla s. \quad (2.3)$$

Hier ist

$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$ die Windgeschwindigkeit,
 ω_E die Erdwinkelgeschwindigkeit,
 p der Druck,
 Φ das Schwerepotential der Erde,
 ρ die Dichte und
 s die massenspezifische Entropie.

Das Flachwassermodell geht aus dem Gleichungssystem (2.1)–(2.3) unter den Annahmen von *Hydrostasie*, *Inkompressibilität* und *zu Beginn verschwindender vertikaler Windscherung* hervor:

- Die *Inkompressibilität* $\frac{d\rho}{dt} = 0$ führt dazu, dass die Kontinuitätsgleichung (2.2) diagnostisch wird. Im z -System gilt dann

$$\nabla_h \cdot \mathbf{v}_h + \partial_z w = 0,$$

wobei $\nabla_h = \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix}$, $\mathbf{v}_h = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ und w die Vertikalgeschwindigkeit ist. Falls die Dichte zur Anfangszeit homogen ist, so bleibt sie das für alle Zeiten. Als vertikale Randbedingungen seien

$$\begin{aligned} w(H) &= \frac{d_h H}{dt} & \text{und} \\ w(\eta) &= \frac{d_h \eta}{dt} \end{aligned}$$

gewählt, wobei die horizontale individuelle Ableitung

$$\frac{d_h}{dt} = \partial_t + \mathbf{v}_h \cdot \nabla_h$$

verwendet wird. Vertikale Integration der höhenunabhängigen Kontinuitätsgleichung ergibt

$$-(\eta - H)\nabla_h \cdot \mathbf{v}_h = \frac{d_h \eta}{dt} - \frac{d_h H}{dt} = \frac{d_h h}{dt}$$

und damit

$$\partial_t h = -\nabla_h \cdot (\mathbf{v}_h h). \quad (2.4)$$

Hier beschreibt $H(x)$ die Bodentopographie und $h(x) = \eta(x) - H(x)$ die Schichtdicke des Fluids wie in Abb. 2.1 dargestellt.

- Mit der *Hydrostasie* $\frac{dw}{dt} = 0$ folgt aus der Vertikalkomponente der Bewegungsgleichung die diagnostische Gleichung

$$0 = -\partial_z p - \rho g.$$

Aus der Homogenität der Dichte resultiert integriert ein lineares Druckprofil

$$p(x, y, z) = p(x, y, z_0) - \rho g(z - z_0)$$

und mit der oberen Randbedingung $p(\eta) = 0$ konkret

$$p(x, y, z) = \rho g(\eta(x, y) - z). \quad (2.5)$$

- Wegen der *anfänglich verschwindenden vertikalen Windscherung* $\partial_z \mathbf{v}_h(t_0) = 0$ entfällt die Vertikaladvektion von Horizontalwind. Die Vertikal Konstanz des horizontalen Windes für alle Zeiten folgt dann aus dem linearen Druckprofil:

$$\partial_z \frac{d_h \mathbf{v}_h}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla_h \partial_z p = 0.$$

Die horizontale Bewegungsgleichung lautet somit

$$\frac{d_h \mathbf{v}_h}{dt} = -f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_h - \frac{1}{\rho} \nabla_h p. \quad (2.6)$$

Der Druckgradientterm ist vertikal konstant und kann in einer beliebigen Referenzhöhe innerhalb der Fluidschicht gewählt werden. Mit dem oben berechneten Druckprofil (2.5) ergibt sich

$$\frac{d_h \mathbf{v}_h}{dt} = -f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_h - g \nabla_h \eta. \quad (2.7)$$

Zusammengefasst resultiert das folgende geschlossene, nichtlineare Gleichungssystem für die Flachwasserdynamik:

$$\partial_t \mathbf{v}_h = -\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h \mathbf{v}_h - f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_h - g \nabla_h (h + H) \quad (2.8)$$

$$\partial_t h = -\nabla_h \cdot (\mathbf{v}_h h). \quad (2.9)$$

Im weiteren Text wird der Einfachheit halber mit flacher Orographie ($H = 0 \Rightarrow h = \eta$) gearbeitet. Die besprochenen Methoden lassen sich aber ohne Weiteres auch auf Systeme mit Orographie anwenden. Außerdem wird der Index ‚h‘ weggelassen, sofern ersichtlich ist, dass die Horizontalkomponente der betreffenden Größe gemeint ist.

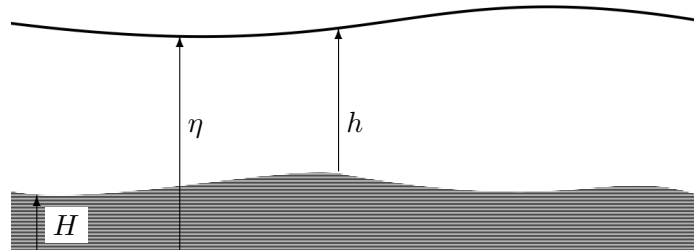


Abbildung 2.1: Das Flachwassermodell

2.1.1 Skalare Form der Flachwassergleichungen

Mit den Größen

ζ Vorticity,

ζ_a absolute Vorticity,

$q = \frac{\zeta+f}{h}$ (absolute) potentielle Vorticity,

$\mu = \nabla \cdot \mathbf{v}$ horizontale Divergenz und

$\Psi = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 + gh$ massenspezifische Gesamtenergie (Bernoulli-Funktion)

sowie der horizontalen Lamb-Aufspaltung des Geschwindigkeitstermes

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \zeta \mathbf{k} \times \mathbf{v} + \frac{1}{2}\nabla\mathbf{v}^2$$

lassen sich die Flachwassergleichungen auch in folgender Form schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= -\zeta \mathbf{k} \times \mathbf{v} - \nabla \Psi \\ \frac{\partial h}{\partial t} &= -\nabla \cdot (h\mathbf{v}). \end{aligned}$$

Die Anwendung der Rotation beziehungsweise der Divergenz auf die horizontale Bewegungsgleichung ergibt prognostische Gleichungen für Vorticity und Divergenz:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\text{div}(\zeta_a \mathbf{v}) \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu}{\partial t} &= -g\Delta h - \text{div}((\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}) + f\zeta - \beta u \\ &= \mathbf{k} \cdot \text{rot}(\zeta_a \mathbf{v}) - \Delta \Psi. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Bei der Verwendung dieser prognostischer Größen wird der Windvektor mit einer geeigneten Methode (Abschnitt C.2) aus Vorticity und Divergenz rekonstruiert. Die verschiedenen Formen der individuellen und lokalzeitlichen Tendenzen sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.

	ζ	μ
$\frac{d}{dt}$	$-\zeta_a \mu$	$-\mu^2 + 2J(u, v) + f\zeta - \beta u + \Delta h$
$\frac{\partial}{\partial t}$	$-\nabla \cdot (\zeta_a \mathbf{v})$	$\mathbf{k} \cdot \nabla \times (\zeta_a \mathbf{v}) - \Delta \Psi$

Tabelle 2.1: Skalare Form der Flachwassergleichungen

Die Gesamtenergie \mathcal{H} des Flachwassersystems setzt sich aus der kinetischen Energie des Fluids sowie der potentiellen Energie der freien Oberfläche zusammen:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{kin}} &= \int dA \frac{1}{2} h \mathbf{v}^2 \\ \mathcal{H}_{\text{pot}} &= \int dA \frac{1}{2} g h^2 \\ \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{pot}}.\end{aligned}$$

Sie ist neben der potentiellen Enstrophie

$$\mathcal{E} = \int dA \frac{1}{2} h q^2 = \frac{1}{2} \int dA \frac{\zeta_a^2}{h}$$

eine Erhaltungsgröße des Systems:

$$\begin{aligned}\partial_t \mathcal{H} &= 0 \\ \partial_t \mathcal{E} &= 0.\end{aligned}$$

Die potentielle Enstrophie ist dabei nur ein Spezialfall einer ganzen Reihe von Casimiren

$$\mathcal{C}_f := \int dA h f(q), \quad (f \text{ beliebig}),$$

insbesondere den PV-Momenten

$$\mathcal{E}_n := \frac{1}{n+2} \int dA h q^{n+2}.$$

\mathcal{E}_0 entspricht dabei der potentiellen Enstrophie und \mathcal{E}_{-1} der Zirkulation. Die Casimire ergeben sich aus der Teilchenumordnungssymmetrie bei der Reduktion der Lagrangeschen in die Eulersche Darstellung. Sie sind äquivalent mit der Erhaltung der PV-Isflächen (Abschnitt 7.4.4).

2.1.2 Balancen des Flachwassermodells

Auf ein Teilchen im Flachwassermodell wirken Druckgradient-, Coriolis- und Zentrifugalkraft. Ein Zustand, in dem sich die ersten beiden Kräfte aufheben, wird geostrophische oder lineare Balance genannt. Wenn sich alle drei Kräfte zu Null addieren, wird von nichtlinearer Balance gesprochen. Der entsprechende Wind heißt dann Gradientwind. Für beide Fälle können Balancegleichungen hergeleitet werden, die erfüllt sein müssen, damit sich das System im entsprechenden Zustand befindet:

- Lineare (geostrophische) Balance $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$ mit Balancegleichung

$$\mathbf{v} = \frac{g}{f} \mathbf{k} \times \nabla h \quad \text{oder} \quad f\zeta - \beta u - g\Delta h = 0.$$

- Nichtlineare Balance: $\frac{d\mu}{dt} + \mu^2 = 0$ mit Balancegleichung

$$2J(u, v) + \underbrace{f\zeta - \beta u - g\Delta h}_{\text{lineare Balance}} = 0, \quad J(u, v) := \partial_x v - \partial_y u.$$

Die Balancegleichungen ergeben sich aus folgenden Formeln für die Advektion von spezifischem Impuls und Divergenz:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} &= \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{v} + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{v}^2 \\ \Rightarrow \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \partial_t \mathbf{v} + \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{v} + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{v}^2 \\ \mathbf{v} \cdot \nabla \mu &= -\mu^2 + \text{div}(\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) + 2J(u, v) \\ \Rightarrow \frac{d\mu}{dt} &= \partial_t \mu - \mu^2 + \text{div}(\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) + 2J(u, v). \end{aligned}$$

Üblicherweise werden Anfangsbedingungen balanciert, um die Amplituden der Schwerewellen zumindest zu Beginn einer Simulation gering zu halten.

2.2 Die Flachwassergleichungen in Hamilton-Darstellung

Hamiltonsche Systeme umfassen zwei verschiedene Gruppen: Die symplektischen Systeme sowie die allgemeineren Poisson-Systeme. In der fluidodynamischen Anwendung bilden nur die Gleichungen in Lagrangescher Form oder die um die Clebsch-Potentiale ergänzten Eulerschen Gleichungen ein symplektisches System. In der allgemeineren Poisson-Darstellung ist auch die ausschließliche Verwendung der Eulerschen Beschreibung möglich. Beim Flachwassermodell treten als prognostische Größen die Höhe sowie zwei Variablen für die Horizontalgeschwindigkeit auf. Letztere können Geschwindigkeitskomponenten, Impulskomponenten oder auch die abgeleiteten Größen Vorticity und Divergenz sein. Aus der Lie-Poisson-Reduktion (Abschnitt A.2.2) der Flachwassergleichungen in individueller Form ergibt sich die Impulsform dieser Gleichungen (Morrison und Greene, 1980). Für die Nambu-Darstellung ist jedoch die Vorticity-Divergenz-Form am geeignetsten (Abschnitt 9.1). Aus diesem Grund wird hier nur diese sowie die Geschwindigkeitsform diskutiert.

2.2.1 Geschwindigkeitsvariablen

Für die Flachwassergleichungen (2.8)–(2.9) existiert die nichtkanonische Hamilton-Darstellung (Morrison und Greene, 1980)

$$\partial_t \mathcal{F}[\mathbf{v}, h] = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} = \int dA \left(q\mathbf{k} \cdot \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}} \times \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} + \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta h} \right). \quad (2.12)$$

Die Integration erstreckt sich dabei über das Definitionsgebiet der Flüssigkeit. \mathcal{F} bezeichnet ein beliebiges Funktional der prognostischen Größen und das Hamilton-Funktional \mathcal{H} ist wie üblich die Gesamtenergie des Systems. Die Funktionalableitungen (Abschnitt B.2) davon ergeben

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}} = h\mathbf{v}, \quad \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} = \Psi.$$

Diese Klammer ist nicht nur nichtkanonisch, sondern auch singular. Es handelt sich also um ein Hamilton-System auf einer Poisson-Mannigfaltigkeit. Die Singularität der Klammer zeigt sich in der Existenz der Wirbel-Casimire \mathcal{C}_f , die mit allen anderen Größen in der Klammer vertauschen:

$$\{\mathcal{C}_f, \mathcal{F}\} = 0 \quad \forall \mathcal{F}.$$

2.2.2 Abgeleitete Variablen

Anstelle der Horizontalgeschwindigkeitskomponenten u und v können auch die abgeleiteten Größen Vorticity ζ und Divergenz μ als prognostische Größen verwendet werden. Unter der Transformation

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \zeta \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_x v - \partial_y u \\ \partial_x u + \partial_y v \end{pmatrix}$$

gilt für die Funktionalableitung die Kettenregel (Anhang B.2)

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta u} &= \partial_y \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} - \partial_x \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} \\ \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta v} &= -\partial_x \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} - \partial_y \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} \end{aligned}$$

oder in vektorieller Form

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}} = -\mathbf{k} \times \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} - \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}.$$

Wird dies in die Poisson-Klammer (2.12) eingesetzt, ergibt sich eine Summe von Klammern:

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} = \underbrace{\int dA q J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right)}_{=:\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\zeta\zeta}} \quad (2.13)$$

$$+ \underbrace{\int dA q J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \right)}_{=:\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\mu\mu}} \quad (2.14)$$

$$+ \underbrace{\int dA \left(q \left(\nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} - \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} \right) + \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} - \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta h} \right)}_{=:\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\zeta\mu h}} \quad (2.15)$$

$$+ \int dA \left(J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} \right) + J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta h}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \right). \quad (2.16)$$

Der Jacobi-Operator kann stets als Divergenz geschrieben werden:

$$J(A, B) = \nabla \cdot (A \nabla B \times \mathbf{k}).$$

Damit verschwinden die beiden Terme in (2.16) bei geeigneten Randbedingungen. Wie später (Abschnitt 9.1) gezeigt wird, ist diese Abhängigkeit von den Randbedingungen typisch für Nambu-Darstellungen zweidimensionaler Fluidodynamik. Zur Berechnung der Funktionalableitungen nach Vorticity und Divergenz werden analog zur Stromfunktion im horizontal divergenzfreen Modell die Stromfunktion χ und das Geschwindigkeitspotential γ zur Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes eingeführt (Anhang C):

$$h\mathbf{v} = \underbrace{-\text{rot}(\mathbf{k}\chi)}_{\mathbf{k} \times \nabla \chi} + \text{grad}(\gamma) \quad (2.17)$$

Daraus ergibt sich eine Aufspaltung des Impulses in einen solenoidalen (divergenzfreien) und einen irrotationalen (wirbelfreien) Anteil (Abb. 2.2):

$$\begin{aligned} h\mathbf{v}^\chi &:= \mathbf{k} \times \nabla \chi && \text{Solenoidaler Impuls} \\ h\mathbf{v}^\gamma &:= \nabla \gamma && \text{Irrotationaler Impuls} \end{aligned}$$

Im Folgenden werden der Einfachheit halber \mathbf{v}^χ und \mathbf{v}^γ auch als solenoidaler beziehungsweise als irrotationaler Wind bezeichnet, obwohl diese Begriffe eigentlich nur auf den zugehörigen Impuls zutreffen. Vorticity und Divergenz lassen sich durch die Potentiale folgendermaßen ausdrücken:

$$\begin{aligned} \zeta &= \nabla \cdot \left(\frac{1}{h} \nabla \chi \right) + J\left(\frac{1}{h}, \gamma\right) \\ \mu &= \nabla \cdot \left(\frac{1}{h} \nabla \gamma \right) + J\left(\chi, \frac{1}{h}\right). \end{aligned}$$

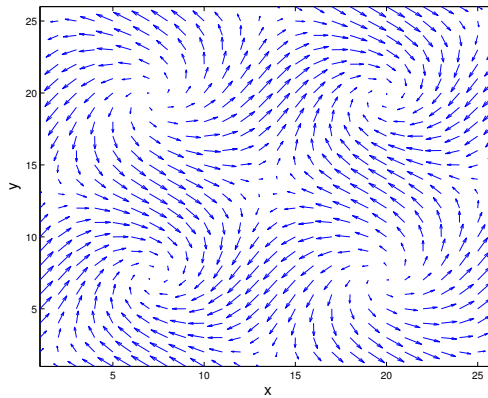
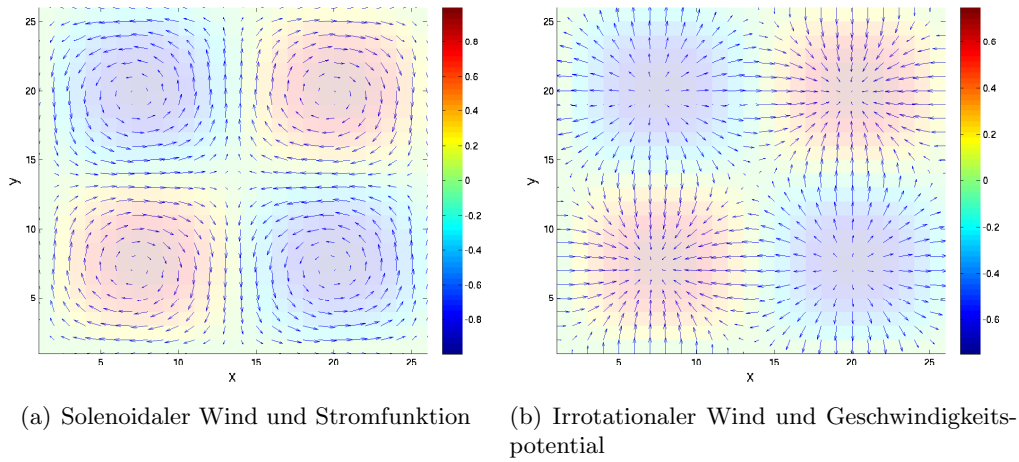


Abbildung 2.2: Helmholtz-Zerlegung

Die Rekonstruktion der Potentiale aus gegebenem Vorticity- und Divergenzfeld wird in Anhang C diskutiert. Die Funktionalableitungen der Energie nach den abgeleiteten Größen ergeben sich aus der Kettenregel gemäß Anhang B.2:

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} = -\chi, \quad \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} = -\gamma, \quad \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} = \Psi. \quad (2.18)$$

Per Definition der Hamilton-Darstellung ergeben diese Ausdrücke zusammen mit den prognostischen Größen in die Poisson-Klammer eingesetzt wieder die Flachwassergleichungen.

2.3 Die n -Schicht-Flachwassergleichungen

Die Flachwassergleichungen zeichnen sich unter anderem durch eine homogene Dichte und ein lineares Druckprofil aus. Damit verschwindet die vertikale Windscherung und das System ist barotrop, d. h. es gibt keinen thermodynamischen Freiheitsgrad. Eine naheliegende Verallgemeinerung ist die Betrachtung mehrerer übereinanderliegender Schichten mit jeweils konstanter Dichte (Abbildung 2.3). Das Druckprofil ergibt sich dann ‚stückweise linear‘ und an den Schichtgrenzen tritt ein Vertikalgradient des Horizontalwindes auf. Anschaulich gesprochen werden mehrere nicht-mischende Fluide unterschiedlicher Dichte betrachtet. So gesehen ist auch in dieser Verallgemeinerung keine Thermodynamik involviert. Werden jedoch die Schichten als isentrope Schichten interpretiert, in denen sich die Dichte aus der hydrostatischen Grundgleichung ergibt, kann dieses Modell auch als vertikal diskrete Vorstufe zum hydrostatischen Modell aufgefasst werden.

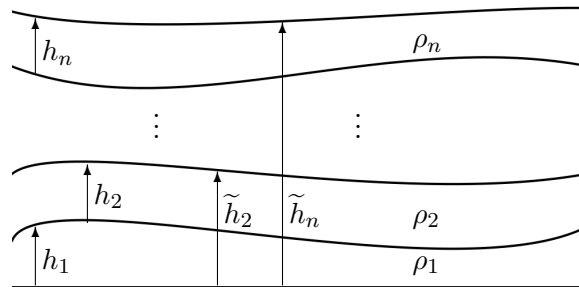


Abbildung 2.3: Das n -Schichtmodell

Der Einfachheit halber sei eine ebene Bodentopographie vorgegeben und das Koordinatensystem so gewählt, dass $z = 0$ mit dem Boden zusammenfällt. Analog zum Einschicht-Fall ergeben sich die Mehrschicht-Flachwassergleichungen aus den ursprünglichen, nichthydrostatischen Gleichungen unter folgenden Annahmen:

- Die *schichtweise Inkompressibilität* $\frac{d\rho_i}{dt} = 0$ führt dazu, dass die Kontinuitätsgleichung diagnostisch wird:

$$\nabla_h \cdot \mathbf{v}_{h,i} + \partial_z w_i = 0.$$

Der Index i bezeichnet hier jeweils Größen in Schicht i . Als vertikale Randbedingungen sei jeweils

$$w(\tilde{h}_i) = \frac{d\tilde{h}_i}{dt}$$

gewählt. Durch Integration der Kontinuitätsgleichung ergeben sich wieder die Be-

wegungsgleichungen der Schichthöhen:

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{h}_{i-1}}^{\tilde{h}_i} dh \partial_z w &= w(\tilde{h}_i) - w(\tilde{h}_{i-1}) = \frac{d\tilde{h}_i}{dt} - \frac{d\tilde{h}_{i-1}}{dt} = \frac{dh_i}{dt} \\
&= - \int_{\tilde{h}_{i-1}}^{\tilde{h}_i} dh \nabla_h \cdot \mathbf{v}_{h,i} = -h_i \nabla_h \cdot \mathbf{v}_{h,i} \\
\Rightarrow \partial_t h_i &= -\nabla_h \cdot (h_i \mathbf{v}_{h,i}).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Hier ist $\tilde{h}_i := \sum_{j=1}^i h_j$ die Höhe der i -ten Grenzschicht.

- Aus der *Hydrostasie* $\frac{dw}{dt} = 0$ folgt, dass sich die vertikale Bewegungsgleichung auf die folgende diagnostische Gleichung reduziert:

$$0 = -\partial_z p(x, y, z) - \sum_i \chi_i(x, y, z) \rho_i g.$$

Hier ist χ_i die charakteristische Funktion in Schicht i . Aus dem schichtweise homogenen Dichtefeld ergibt sich integriert mit der Randbedingung $p(\tilde{h}_n) = 0$ das stückweise lineare Druckprofil

$$p(x, y, z) = \underbrace{p(\tilde{h}_n)}_{=0} + \int_{\tilde{h}_n}^z dz \frac{\partial p}{\partial z} = g \rho_{\varepsilon(z)} \left(\tilde{h}_{\varepsilon(z)} + \sum_{j=\varepsilon(z)+1}^n h_j \frac{\rho_j}{\rho_{\varepsilon(z)}} - z \right).$$

Hier ist $\varepsilon(z) := \min\{j \in \mathbb{N} | \tilde{h}_j > z\}$ die Schichtnummer, in der sich z befindet.

- Genau wie im Einschichtfall, bleibt ein *Anfangszustand ohne vertikale Windscheerung* für alle Zeiten so und für die horizontale Bewegungsgleichung ergibt sich

$$\frac{d_h \mathbf{v}_{h,i}}{dt} = -f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_{h,i} - \frac{1}{\rho_i} \nabla_h p,$$

wobei $\nabla_h p$ im Unterschied zum Einschichtmodell in allen Schichten unterschiedliche Werte annehmen kann. Die horizontale Bewegungsgleichung in Schicht i lautet damit

$$\frac{d_h \mathbf{v}_{h,i}}{dt} = -f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_{h,i} - g \nabla \left(\tilde{h}_i + \sum_{j=i+1}^n h_j \frac{\rho_j}{\rho_i} \right). \tag{2.20}$$

Zusammengefasst ergibt sich das Gleichungssystem für das n -Schicht-Flachwassermodell in Eulerscher Form:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_{h,i}}{\partial t} = -\mathbf{v}_{h,i} \cdot \nabla \mathbf{v}_{h,i} - f \mathbf{k} \times \mathbf{v}_{h,i} - g \nabla \left(\tilde{h}_i + \sum_{j=i+1}^n h_j \frac{\rho_j}{\rho_i} \right) \tag{2.21}$$

$$\partial_t h_i = -\nabla_h \cdot (h_i \mathbf{v}_{h,i}). \tag{2.22}$$

Diese $3n$ Gleichungen bilden ein geschlossenes Gleichungssystem für die n Höhen und die $2n$ Horizontalgeschwindigkeiten. Die Indizes h werden fortan wieder weggelassen. Die horizontale Bewegungsgleichung kann mit der Bernoulli-Funktion

$$\Psi_i = \frac{1}{2} \mathbf{v}_i^2 + g \left(\tilde{h}_i + \sum_{j=i+1}^n h_j \frac{\rho_j}{\rho_i} \right)$$

und der schichtweisen Weberschen Aufspaltung in folgende Form gebracht werden:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = -(\zeta_i + f) \mathbf{k} \times \mathbf{v}_i - \nabla \Psi_i. \quad (2.23)$$

Mit Vorticity und Divergenz als prognostische Größen ergibt sich schließlich die skalare Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot ((\zeta_i + f) \mathbf{v}_i) \\ \frac{\partial \mu_i}{\partial t} &= \mathbf{k} \cdot \nabla \times ((\zeta_i + f) \mathbf{v}_i) - \Delta \Psi_i. \end{aligned}$$

Diese Dynamik erhält in jeder Schicht individuell die potentielle Vorticity $q_i = \frac{\zeta_i + f}{h_i}$ und damit sowohl schichtweise als auch global die potentielle Enstrophie

$$\mathcal{E}_p = \int dA \int_0^{\tilde{h}_n} dz \frac{1}{2} \rho q^2 = \frac{1}{2} \sum_j \rho_j \int dA \frac{(\zeta_j + f)^2}{h_j}. \quad (2.24)$$

Die Gesamtenergie setzt sich aus kinetischer und potentieller Energie der einzelnen Schichten zusammen:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{kin}} &= \int dA \int_0^{\tilde{h}_n} dz \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 = \frac{1}{2} \sum_j \rho_j \int dA h_j \mathbf{v}_j^2 \\ \mathcal{H}_{\text{pot}} &= \int dA \int_0^{\tilde{h}_n} dz \rho g z = g \int dA \sum_j \rho_j \int_{\tilde{h}_{j-1}}^{\tilde{h}_j} z dz \\ &= \frac{g}{2} \int dA \sum_j \rho_j (\tilde{h}_j^2 - \tilde{h}_{j-1}^2) = \frac{g}{2} \int dA \sum_j \rho_j (h_j^2 + 2h_j \tilde{h}_{j-1}) \\ \Rightarrow \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_j \rho_j \int dA \left(h_j \mathbf{v}_j^2 + g(h_j^2 + 2h_j \tilde{h}_{j-1}) \right). \end{aligned}$$

Im Gegensatz zur Enstrophie, ist die Energie nicht schichtweise sondern nur global erhalten, es findet also ein vertikaler Energieaustausch statt.

Kapitel 3

Die Nambu-Darstellung

Wie in Abb. 3.1 skizziert gibt es Hamiltonsche Systeme auf symplektischen und auf den allgemeineren Poisson-Mannigfaltigkeiten (Anhang A). Letztere können entartete Poisson-Klammern aufweisen, d. h. es können Casimir-Erhaltungsgrößen vorkommen. In dem Fall werden sie, im Gegensatz zu den regulären, symplektischen Systemen, auch ‚singulär‘ genannt. Ein Beispiel für ein symplektisches Hamilton-System sind wechselwirkende Massenpunkte und ein Beispiel für ein singuläres Hamilton-System ist der durch die Eulerschen Kreisgleichungen beschriebene rotierende Festkörper. Letzterer ist in dem vollen, nichtreduzierten Phasenraum der Winkel *und* Winkelgeschwindigkeiten auch ein reguläres, symplektisches System. Dies ist ein typisches Beispiel, wie singuläre Systeme durch Reduktion aus regulären hervorgehen (Anhang A). Solche Reduktionen kommen auch in unendlichdimensionalen Phasenräumen vor z. B. in der Fluiddynamik. Dort ergeben sich im Wesentlichen zwei verschiedene Möglichkeiten der Beschreibung: Die Lagrangesche, mitbewegte und die Eulersche, ortsfeste Darstellung. Sie sind nicht gleichwertig, in dem Sinn, dass die Eulersche aus der Lagrangeschen durch eine Reduktion hervorgeht. Die mit der entsprechenden Teilchenumordnungssymmetrie verbundenen Erhaltungsgrößen sind die Wirbel-Casimire (Marsden, 1999; N vir, 2004).

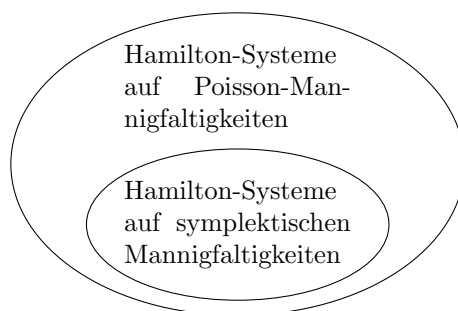


Abbildung 3.1: Hamilton-Systeme

In Nambu (1973) wurde erstmals angeregt, einen der Casimire eines singulären Systems als ‚zusätzlichen‘ Hamiltonian zu verwenden und die bilineare, antisymmetrische

Poisson-Klammer durch eine trilineare, zweifach antisymmetrische Nambu-Klammer zu ersetzen.¹ Dies wurde an einem konkreten Beispiel, dem erwähnten Eulerschen Kreisel, vorgeführt und damit eine bestimmte Form der Nambu-Klammer angegeben. Takhtajan (1994) schlug eine allgemeine mathematische Formulierung von Nambu-Systemen vor und diskutierte eine Erweiterung auf Nambu- n -Klammern. In diesem Sinn ist jede Poisson-Klammer auch eine Nambu-2-Klammer. Umgekehrt kann aus jeder Nambu-Darstellung eines Systems durch Kontraktion eine Hamilton-Darstellung abgeleitet werden.

Die Nambu-Darstellung beschreibt also genau die Poisson-Systeme in Abb. 3.1. Sie misst den Casimir-Erhaltungsgrößen besonderen Wert zu, indem diese, wie die Energie, als konstituierende Hamiltonians eingesetzt werden. Für spezielle Anwendungen ergeben sich daraus interessante Vorteile.

3.1 Definition und Eigenschaften

Von Nambu (1973) wurde diese Darstellung ursprünglich in drei Dimensionen an folgendem speziellen Beispiel definiert:

Beispiel 1 (Eine Nambu-Klammer auf \mathbb{R}^3). Für beliebige Funktionen² $F, G, H : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ sei die folgende Klammer definiert:

$$\{F, G, H\} := \nabla F \cdot \nabla G \times \nabla H = \frac{\partial F, G, H}{\partial(x, y, z)}.$$

Diese ist offensichtlich trilinear und zweifach antisymmetrisch. Aus der Definition über die Gradienten folgt auch die Produktregel.

Diese Klammer ist der Prototyp einer Nambu-Klammer. Die Eulerschen Kreiselgleichungen können mit ihr als Nambu-System geschrieben werden:

Beispiel (Eulersche Kreiselgleichung als Nambu-System). Gegeben seien die Eulerschen Kreiselgleichungen

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{I_y - I_z}{I_y I_z} L_y L_z \\ \frac{I_z - I_x}{I_z I_x} L_z L_x \\ \frac{I_x - I_y}{I_x I_y} L_x L_y \end{pmatrix}$$

als nichtlineare, prognostische Gleichungen für den Drehimpuls \mathbf{L} in Abhängigkeit von den Trägheitsmomenten I_x, I_y, I_z . Dafür ist die Hamiltonsche Darstellung

$$\frac{d}{dt} F = \{F, H\} = \nabla F \cdot \mathbf{L} \times \nabla H, \quad H = \frac{1}{2} \left(\frac{L_x^2}{I_x} + \frac{L_y^2}{I_y} + \frac{L_z^2}{I_z} \right) \quad (3.1)$$

¹Die Bezeichnungen ‚Nambu-Klammer, -System, -Tensor‘ usw. wurden erst später eingeführt.

²Im Folgenden sei jeweils ausreichende Differenzierbarkeit vorausgesetzt.

bekannt. F ist hier eine beliebige Funktion auf dem Phasenraum, z. B. $F = L_x$. Die Gradienten beziehen sich dabei auf den Phasenraum und werden durch partielle Ableitungen nach den Drehimpulsenkomponenten berechnet:

$$\nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial L_x}, \frac{\partial F}{\partial L_y}, \frac{\partial F}{\partial L_z} \right)^T.$$

Das Quadrat des Gesamtdrehimpulses $G = \frac{1}{2} \mathbf{L}^2$ ist ein Casimir dieser Poisson-Klammer: Es gilt

$$\{F, G\} = 0 \quad \forall F,$$

was direkt aus der Antisymmetrie des Kreuzproduktes folgt. Damit und mit der Klammer aus Beispiel 1 lassen sich die Eulerschen Kreiselgleichungen auch als Nambu-System schreiben:

$$\frac{d}{dt} F = \{F, G, H\} = \nabla F \cdot \nabla G \times \nabla H.$$

Zusätzlich zu diesem Beispiel werden in Nambu (1973) zwei Verallgemeinerungen erwähnt. Zum einen der Fall mit derselben Klammer aus Beispiel 1 aber mehreren konstituierenden Funktionen G_i, H_i :

$$\frac{d}{dt} F = \sum_{i=1}^N \frac{\partial(F, G_i, H_i)}{\partial(x, y, z)}.$$

Dieser Fall wird hier nicht weiter betrachtet. Er findet in der Nambu-Formulierung der nichthydrostatischen Hydro-Thermodynamik Anwendung (Névir und Sommer, 2009). In die drei verschiedenen Teilklammern werden dort die Helizität, die Masse und die Entropie eingesetzt. Zum anderen wird eine Verallgemeinerung auf $3N$ -dimensionale Phasenräume mit Koordinaten (x_i, y_i, z_i) definiert:

$$\frac{d}{dt} F = \sum_{i=1}^N \frac{\partial(F, G, H)}{\partial(x_i, y_i, z_i)}. \quad (3.2)$$

Damit können, analog zur Vielteilchen-Hamiltondarstellung, gekoppelte Kreisel- (oder Spin-)systeme beschrieben werden. Zwischen der Hamilton- und der Nambu-Darstellung für Vielkörper-Systeme gibt es allerdings wichtige strukturelle Unterschiede (Kapitel 9). Die Form (3.2) ist ein Beispiel für eine Klammer, die Systeme in mehr als drei Dimensionen und damit auch nichtintegrale Systeme beschreibt.

Eine allgemeine mathematische Charakterisierung der Nambu-Darstellung findet sich in Takhtajan (1994). Die Nambu-Klammer wird darin über ihre Eigenschaften definiert:

Definition (Nambu-Klammer, Nambu-System). *Eine Nambu-Klammer der Ordnung r auf dem Phasenraum M ist eine r -lineare, antisymmetrische Abbildung*

$$\{\cdot, \dots, \cdot\} : \mathcal{C}^\infty(M) \times \dots \times \mathcal{C}^\infty(M) \rightarrow \mathcal{C}^\infty(M),$$

welche die Leibniz- und die Takhtajan-Identität³ erfüllt. Ein prognostisches Gleichungssystem in der Form

$$\frac{d}{dt}F = \{F, H_1, \dots, H_{r-1}\}$$

wird Nambu-System und die Größen H_i werden konstituierende Größen genannt.

Linearität $\{F + G, H_1, \dots, H_{r-1}\} = \{F, H_1, \dots, H_{r-1}\} + \{G, H_1, \dots, H_{r-1}\}$.

Antisymmetrie $\{H_1, \dots, H_r\} = \text{sgn}(\sigma)\{H_{\sigma(1)}, \dots, H_{\sigma(r)}\}$ Für alle Permutationen σ mit Signum $\text{sgn}(\sigma)$.

Leibniz-Identität

$$\{FG, H_1, \dots, H_{r-1}\} = F\{G, H_1, \dots, H_{r-1}\} + G\{F, H_1, \dots, H_{r-1}\}.$$

Takhtajan-Identität

$$\begin{aligned} & \{\{H_1, \dots, H_r\}, H_{r+1}, \dots, H_{2r-1}\} \\ & + \{H_r, \{H_1, \dots, H_{r-1}, H_{r+1}\}, H_{r+2}, \dots, H_{2r-1}\} \\ & + \dots + \{H_r, \dots, H_{2r-2}, \{H_1, \dots, H_{r-1}, H_{2r-1}\}\} \\ & = \{H_1, \dots, H_{r-1}, \{H_r, \dots, H_{2r-1}\}\}. \end{aligned}$$

Von dieser Definition wird im Folgenden in drei Punkten abgewichen:

- Die Takhtajan-Identität ist als Verallgemeinerung der Jacobi-Identität eingeführt worden. Letztere hat neben der geometrischen auch eine algebraische Interpretation, wie in Tab. 3.1 aufgeführt. Eine konsequente Verallgemeinerung auf die Nambu-Mechanik wäre mit einer ‚ r -ären Algebra‘ verbunden (Takhtajan, 1994). Für partielle Differentialgleichungen wurde die Takhtajan-Identität bislang erst für die barotrope Vorticitygleichung nachgewiesen (Bihlo, 2008). Allerdings erfüllt z. B. bereits das ursprünglich von Nambu (1973) vorgeschlagene System (3.2) diese Identität nicht. Die Frage der Volumenerhaltung, die eng mit der Jacobi-Identität verknüpft ist, wird in Kapitel 9 diskutiert. Für die Darstellung der Erhaltungseigenschaften ist die Takhtajan-Identität von untergeordneter Bedeutung. Aus diesen Gründen wird im Folgenden der Begriff ‚Nambu‘ auch für Systeme angewendet, für die die Takhtajan-Identität nicht nachgewiesen ist, beziehungsweise nicht zutrifft.
- Analog zur Hamiltonschen Feldtheorie wird auch eine Nambu-Feldtheorie berücksichtigt, vgl. Abschnitt 3.2.2. Diese Möglichkeit wurde erstmals in Névir (1998) diskutiert.
- Außerdem werden nur Nambu-Darstellungen der Ordnung drei berücksichtigt. Dies entspricht im Allgemeinen Systemen mit quadratischer Nichtlinearität, was der gängige Fall ist.

	Jacobi-Identität	Takhtajan-Identität
Geometrische Interpretation	Poisson-Tensor (bzw. Phasenraumvolumen) erhalten Symplektische 2-Form geschlossen	
Algebraische Interpretation	Hamiltonsche Vektorfelder bilden Unteralgebra.	
Erhaltungsgrößen	Klammer aus 2 Erhaltungsgrößen ist auch Erhaltungsgröße.	Klammer aus r Erhaltungsgrößen ist auch Erhaltungsgröße.

Tabelle 3.1: Vergleich zwischen Jacobi- und Takhtajan-Identität

Im weiteren Text wird also unter einer Nambu-Klammer eine trilineare, antisymmetrische Abbildung auf dem Phasenraum verstanden, die die Leibniz-Identität, und damit die Produktregel, erfüllt. Dies ist eine pragmatische Wahl, die auch der Definition von Nambu (1973) sehr nahe kommt. Ein Casimir H_2 der Poisson-Klammer wird damit neben dem Hamiltonian H_1 konstituierende Größe der prognostischen Differentialgleichung:

$$\frac{d}{dt}F = \{F, H_1\} = \{F, H_1, H_2\}.$$

Genau wie die Erhaltungseigenschaft für H_1 (üblicherweise eine Energieform) unmittelbar aus der Antisymmetrie der Poisson-Klammer folgt,

$$\frac{dH_1}{dt} = \{H_1, H_1\} = -\{H_1, H_1\} \Rightarrow \frac{dH_1}{dt} = 0,$$

gilt das bei der Nambu-Klammer für beide konstituierende Größen (H_1, H_2):

$$\begin{aligned} \frac{dH_1}{dt} &= \{H_1, H_1, H_2\} = -\{H_1, H_1, H_2\} \Rightarrow \frac{dH_1}{dt} = 0 \\ \frac{dH_2}{dt} &= \{H_2, H_1, H_2\} = -\{H_2, H_1, H_2\} \Rightarrow \frac{dH_2}{dt} = 0 \end{aligned}$$

Da Nambu-Klammern über ihre Eigenschaften definiert sind, sind sie nicht eindeutig. Bisweilen gibt es für ein System mehrere verschiedene Darstellungen, genau wie das auch bei den Poisson-Klammern der Fall ist. Gelegentlich werden die Klammern daher durch Indizes unterschieden. Typische Nambu-Klammern (z. B. die Wirbelklammer) tauchen in mehreren verwandten dynamischen Systemen auf. Weitere geometrische und algebraische Eigenschaften der Nambu-Darstellung werden in Kapitel 9 diskutiert.

³auch Fundamentale oder verallgemeinerte Jacobi-Identität genannt

3.2 Tensor- und Operatorform der Nambu-Darstellung

3.2.1 Tensorielle Form der Nambu-Darstellung

Wie in Anhang A beschrieben, kann auf endlichdimensionalen Mannigfaltigkeiten jede Poisson-Klammer durch den Poisson-Tensor ausgedrückt werden.⁴

$$\{F, H\} = B(dF \otimes dH) = B^{ij} F_{,i} H_{,j}. \quad (3.3)$$

Die Komponenten des Poisson-Tensors B beziehen sich auf die gewählten Koordinaten (z_1, \dots, z_N) und transformieren als kontravarianter Tensor zweiter Stufe (ein ‚Bivektor‘). Für die partiellen Ableitungen wird die Notation

$$F_{,i} := \frac{\partial F}{\partial z_i}$$

verwendet, und über gleiche Indizes wird jeweils summiert (Summenkonvention). Der Poisson-Tensor braucht dabei lediglich die Antisymmetrieeigenschaft zu erfüllen. Die Bilinearität und die Leibniz-Identität folgen direkt aus der Linearität der Darstellung beziehungsweise aus der Produktregel für die partielle Ableitung. In Matrix-Form geschrieben bedeutet dies

$$\{F, H\} = \nabla F^T B \nabla H.$$

Bezüglich des Euklidischen Skalarproduktes ist B also eine anti-selbstadjungierte Abbildung. Diese Notation lässt sich auf die Nambu-Klammer übertragen, sie kann durch den Nambu-Tensor in Komponenten ausgedrückt werden:

$$\{F, G, H\} = N(dF \otimes dG \otimes dH) = N^{ijk} F_{,i} G_{,j} H_{,k}. \quad (3.4)$$

Die Stellung des Casimirs in der Klammer ist dabei irrelevant, gewöhnlich wird er als zweites oder drittes Argument verwendet. Die Komponenten des Nambu-Tensors N transformieren als kontravarianter Tensor dritter Stufe (ein ‚Trivektor‘). Da für einen Tensor dritter Stufe keine Matrixdarstellung existiert und ein Skalarprodukt stets zwei und nicht drei Vektoren verbindet, kann hier aber im Gegensatz zum Hamilton-Fall nicht von Anti-Selbstadjungiertheit gesprochen werden.

In dieser Form wird auch klar, dass die Dimension des Phasenraumes nicht notwendigerweise 3, also der Anzahl Klammerargumente sein muss. Tatsächlich ist dies sogar selten der Fall. Dennoch gibt es einen engen Zusammenhang zwischen beiden, was in Abschnitt 9.1 diskutiert wird.

3.2.2 Nambu-Darstellung für Feldgleichungen

Die obige Definition einer Nambu-Klammer kann analog zur Hamilton-Darstellung auf Feldgleichungen übertragen werden (Névir, 1998). Typischerweise ist der Phasenraum in der allgemeinen Fluidodynamik eine Menge von ausreichend differenzierbaren Funktionen

⁴Eine Einführung in die Differentialgeometrie mit allen für das Folgende benötigten Begriffen ist in Schutz (1980) oder Marsden (1999) zu finden.

auf einem Gebiet V , welches eine zweidimensionale Schicht oder ein dreidimensionaler Ausschnitt der Atmosphäre sein kann. Die Felddarstellung von Poisson-Klammern lautet dann

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}_1\} = \int dV \mathcal{B} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta z}, \frac{\delta \mathcal{H}_1}{\delta z} \right), \quad (3.5)$$

wobei \mathcal{B} einem anti-selbstadjungierten Operator bezüglich des L^2 -Skalarproduktes auf V entspricht. \mathcal{F} und \mathcal{H}_1 sind Funktionale auf V und $\frac{\delta}{\delta z}$ bezeichne die Variationsableitung nach der allgemeinen Variable z (Anhang B.2). Der entsprechende Ausdruck für die Nambu-Darstellung ist

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}_1, \mathcal{F}_2\} = \int dV \mathcal{N} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta z}, \frac{\delta \mathcal{H}_1}{\delta z}, \frac{\delta \mathcal{H}_2}{\delta z} \right).$$

\mathcal{N} ist hier ein linearer, antisymmetrischer Operator und kann aus demselben Grund wie im endlichdimensionalen Fall nicht als anti-selbstadjungiert bezeichnet werden.

Kapitel 4

Energie-Wirbel-Theorie

Außer den ursprünglich von Nambu (1973) vorgeschlagenen Eulerschen Kreiselgleichungen ist die Nambu-Darstellung vor allem auf fluiddynamische Systeme angewendet worden. Solche Systeme sind in Eulerscher Darstellung singular in dem Sinn, dass sie Casimire aufweisen. Diese Casimire können zur Konstruktion von Nambu-Darstellungen benutzt werden. Die Anwendung auf partielle Differentialgleichungen verallgemeinerte dabei auch die ursprüngliche Form für gewöhnliche Differentialgleichungen. Es sind Nambu-Darstellungen für verschiedene, sowohl diskrete als auch kontinuierliche meteorologische Modelle bekannt, vgl. Tab. 4.1. Das allgemeine Konzept, atmosphärendynamische Systeme in Nambu-Form zu schreiben, wird als Energie-Wirbel-Theorie (engl. Energy-Vorticity-Theory, EVT) bezeichnet. Diese hat auch Eingang in die Modellierung des Wetter- und Klimavorhersagemodells ICON gefunden (Gassmann und Herzog, 2008). In den folgenden Abschnitten wird die Nambu-Darstellung der barotropen Vorticitygleichung als typisches Beispiel vorgestellt, außerdem als Voraussetzung zur numerischen Umsetzung auch die Nambu-Darstellung der Flachwassergleichungen. Die Anwendung auf weitere atmosphärendynamische Systemen wird in Kapitel 8 diskutiert.

Die Bezeichnung ‚Energie-Wirbel-Theorie‘ erklärt sich durch die Tatsache, dass stets die Energie und eine Wirbelgröße als konstituierende Funktionen (bzw. Funktionale) auftreten. Diese charakteristische Eigenschaft der Fluidynamik war auch die Motivation zur Entwicklung des Dynamischen Zustandsindex (engl. Dynamic state index, DSI) (Névir, 2004; Weber und Névir, 2008). Dieser skalare Index beschreibt die Abweichung eines Zustandes der Atmosphäre von einem Energie-Wirbel-Grundzustand. Er wird erfolgreich auf verschiedensten Skalen zur Diagnostik und Interpretation von Aktivitätszentren verwendet, z. B. im Bezug auf Niederschlag (Claussnitzer et al., 2008).

4.1 Die barotrope Vorticitygleichung in Nambu-Darstellung

Die zweidimensionale Vorticitygleichung

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -J(\psi, \zeta)$$

Inkompressible Dynamik (2D und 3D)	Névir und Blender (1993)
Quasigeostrophische Dynamik	Névir (1998), Névir und Sommer (2009)
Flachwassergleichungen	Salmon (2005, 2007)
Mehrschichtsysteme	Abschnitt 8.2, Névir und Sommer (2009)
Hydrostatisches System	Abschnitt 8.3, Névir und Sommer (2009)
Nichthydrostatisches System	Névir (1998), Névir und Sommer (2009)
Raleigh-Bénard-Konvektion	Bihlo (2008)
Lorenz'60	Bihlo und Staufer (2010)
Lorenz'63	Névir und Blender (1994)
Punktwirbel	Névir (1998)
Wellentriade	Abschnitt 8.4
Lorenz'86	Abschnitt 8.5

Tabelle 4.1: Kontinuierliche (oben) und diskrete (unten) atmosphärendynamische Systeme in Nambu-Form

ist eine nichtlineare, partielle Differentialgleichung zur Prognose der Vorticity ζ einer horizontalen, inkompressiblen Strömung. ψ ist dabei die Stromfunktion des Windes

$$\mathbf{v} = \mathbf{k} \times \nabla \psi$$

und ist mit der Vorticity über die elliptische Gleichung

$$\Delta \psi = \zeta$$

verbunden. Sie beschreibt die größten in der Meteorologie vorkommenden Skalen und nur eine Wellenform, die Rossby-Wellen. Gerade diese Einfachheit war Voraussetzung für die erste erfolgreiche Wettervorhersage, die auf der Grundlage der Vorticitygleichung erstellt wurde (Charney et al., 1950). Die Energie dieses Systems besteht ausschließlich aus dem kinetischen Anteil

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int dA \mathbf{v}^2,$$

da weder Gravitation noch Thermodynamik durch dieses System beschrieben werden. Außerdem gibt es eine unendliche Menge von Wirbel-Casimiren

$$\mathcal{E}_f := \int dA f(\zeta),$$

darunter insbesondere die Zirkulation und die Enstrophie:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \int dA \zeta \\ \mathcal{E} &= \frac{1}{2} \int dA \zeta^2.\end{aligned}$$

Dieses System kann mit der Poisson-Klammer

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} = \int dA J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \zeta$$

als Hamilton-System auf einer Poisson-Mannigfaltigkeit geschrieben werden. Die Klammer ist dabei singular mit obengenannten Wirbel-Casimiren. Auf deren Basis lässt sich die folgende Nambu-Klammer definieren (Névir und Blender, 1993):

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\} = \int dA J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta}. \quad (4.1)$$

Eine Antisymmetrie folgt lokal aus der Divergenzfreiheit (was hier der Massenerhaltung entspricht) und die andere aus den periodischen (oder anderen geeigneten) Randbedingungen. Die Vorticity-Klammer taucht auch in der Nambu-Darstellung der Flachwassergleichungen und des quasigeostrophischen Systems auf. Die Klammer (4.1) kann außerdem zur Verwendung mit beliebigen Momenten der Vorticity als zweite konstituierende Größe verallgemeinert werden (Salmon, 2005). Deren Verwendung für die Diskretisierung der Vorticitygleichung hat sich jedoch als unpraktikabel erwiesen. Zum einen schränkt die dabei notwendigerweise auftretende Singularität der Darstellung¹ die Flexibilität der Methode stark ein. Zum anderen zeichnen sich so konstruierte Schemen durch schlechte numerische Stabilitätseigenschaften aus.

4.2 Die Flachwassergleichungen in Nambu-Darstellung

Die Nambu-Darstellung der Flachwassergleichungen geht auf Salmon (2005, 2007) zurück. Wie in Abschnitt 9.1 gezeigt wird, ist die einfachste Form in einer Darstellung mit Vorticity, Divergenz und Höhe als prognostische Größen zu erwarten. In Abschnitt 2.2 wurde die nichtkanonische Poisson-Klammer der Flachwasserdynamik diskutiert. In der Vorticity-Divergenz-Darstellung ergab sich eine Summe von Klammern:

$$\{\cdot, \cdot\} = \{\cdot, \cdot\}_{\zeta\zeta} + \{\cdot, \cdot\}_{\mu\mu} + \{\cdot, \cdot\}_{\zeta\mu h}.$$

Aus diesen drei Einzelklammern können Nambu-Klammern mit der potentiellen Enstrophie als konstituierende Erhaltungsgröße hergeleitet werden:

¹Die Singularität der Darstellung ist von der Singularität des Poisson-Tensors zu unterscheiden, vgl. Abschnitt 4.2

- Die $\zeta\zeta$ -Klammer (2.13) ergibt sich analog zum inkompressiblen Fall (Névir und Blender, 1993):

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\zeta\zeta} = \int dA J \left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\zeta}, \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} \right) \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\zeta} =: \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\zeta\zeta}. \quad (4.2)$$

- Die $\mu\mu$ -Klammer (2.14) kann durch Addition einer Summe aus zyklischen Vertauschungen antisymmetrisiert werden:

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\mu\mu} = \int dA J \left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mu}, \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} \right) \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\mu} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}) =: \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\mu\mu\zeta}. \quad (4.3)$$

Dadurch folgt aus der Antisymmetrie des Jacobi-Operators auch die zweite Antisymmetrie. Die Addition der zwei Terme verändert dabei die Bewegungsgleichungen nicht, da die potentielle Enstrophie funktional unabhängig von der Divergenz ist. Weil auch jede vernünftige Diskretisierung diese Eigenschaft aufweist, haben die Permutationsterme rein formalen Charakter.

- Bei der $\zeta\mu h$ -Klammer (2.15) bedarf es ebenfalls der Darstellung als Summe über eine zyklische Vertauschung, um eine zweifache Antisymmetrie zu garantieren:

$$\begin{aligned} \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\zeta\mu h} &= - \int dA \frac{1}{\partial_x q} \left(\partial_x \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mu} \partial_x \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} - \partial_x \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} \partial_x \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\zeta} \right) \partial_x \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta h} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}) \\ &\quad - \int dA \frac{1}{\partial_y q} \left(\partial_y \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mu} \partial_y \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} - \partial_y \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} \partial_y \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\zeta} \right) \partial_y \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta h} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}) \\ &=: \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Im Folgenden werden die einzelnen zyklischen Permutationen mit den Indizes π_1, π_2 und π_3 bezeichnet. Diese Klammer weist zwei Besonderheiten auf: Zum einen gibt es offenbar keine Möglichkeit, sie in invarianter Form (d. h. durch Vektoren und Operatoren) zu schreiben. Zum anderen treten die singulären Vorfaktoren $\frac{1}{\partial_x q}, \frac{1}{\partial_y q}$ auf. Wenn für \mathcal{F} die prognostischen Größen ζ, μ, h eingesetzt werden, kürzt sich der Nenner weg und es ergeben sich die Flachwassergleichungen in gewöhnlicher Form ohne Singularität. Bei der Diskretisierung dieser Klammer spielen diese PV-Gradienten im Nenner eine wichtige Rolle (Kapitel 7). Die hier auftretenden Singularitäten in Form von Brüchen sind nicht mit der Singularität des Poisson-Tensors ($\det B = 0$) zu verwechseln. Diese ermöglicht die Existenz von Casimiren und damit einer Nambu-Darstellung. Die Singularität ist damit eine charakteristische Systemeigenschaft. Obige Singularität der Nambu-Darstellung hat jedoch keine physikalische Bedeutung in diesem Sinn. Sie kürzt sich durch Einsetzen der prognostischen Größen.

Zusammengesetzt ergibt sich so das Flachwassersystem in Nambu-Darstellung:

$$\frac{\partial\mathcal{F}[\zeta, \mu, h]}{\partial t} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\mu\mu\zeta} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\zeta\zeta} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h},$$

wobei die Klammern wie oben definiert sind.

Um aufzuzeigen, welche Terme in den Flachwassergleichungen durch welche Klammern dargestellt sind, werden in diesem Abschnitt explizit die prognostischen Größen Vorticity, Divergenz und Höhe in die Klammern eingesetzt und die Operatoren ausgewertet:

- Für die Vorticitytendenz ergibt sich der Term aus der $\zeta\zeta\zeta$ -Klammer und einer aus der $\zeta\mu h$ -Klammer wie folgt

$$\begin{aligned}
\{\zeta, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\zeta\zeta} &= \mathbf{k} \cdot \nabla \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} \times \nabla \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\zeta} = \mathbf{k} \cdot \nabla q \times \nabla \chi \\
&= \mathbf{k} \cdot \text{rot}(q\nabla\chi) \\
&= -h\mathbf{v}^\chi \cdot \nabla q \\
&= -\text{div}(\mathbf{v}^\chi \zeta) \\
\{\zeta, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h} &= \nabla \cdot \left(\frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\zeta} \nabla \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} \right) = -\nabla \cdot (q\nabla\gamma) \\
&= -\text{div}(\mathbf{v}^\gamma \zeta) \\
\Rightarrow \{\zeta, \mathcal{H}, \mathcal{E}\} &= -\text{div}(\zeta_a \mathbf{v}^\chi) - \text{div}(\zeta_a \mathbf{v}^\gamma) \\
&= -\text{div}(\mathbf{v} \zeta_a).
\end{aligned}$$

Die Divergenz des solenoidalen Vorticityflusses wird also durch die Vorticityklammer und die Divergenz des irrotationalen Vorticityflusses durch die gemischte Klammer ausgedrückt.

- Die Tendenz der Divergenz wird durch einen Permutationsterms aus der $\mu\mu\zeta$ - und zweien aus der $\zeta\mu h$ -Klammer dargestellt:

$$\begin{aligned}
\{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\mu\mu\zeta} &= -\mathbf{k} \cdot \nabla \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\zeta} \times \nabla \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} = \mathbf{k} \cdot \nabla q \times \nabla \gamma \\
&= \mathbf{k} \cdot \text{rot}(q\nabla\gamma) \\
&= \mathbf{k} \cdot \nabla q \times h\mathbf{v}^\gamma \\
&= \mathbf{k} \cdot \text{rot}(qh\mathbf{v}^\gamma) \\
\{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_1} &= \nabla \cdot \left(\frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\zeta} \nabla \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} \right) = -\nabla \cdot (q\nabla\chi) \\
&= \mathbf{k} \cdot \text{rot}(qh\mathbf{v}^\chi) \\
\{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_2} &= -\Delta \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta h} = -\Delta \Psi. \\
\Rightarrow \{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\} &= \mathbf{k} \cdot \text{rot}(qh\mathbf{v}) - \Delta \Psi
\end{aligned}$$

Die Rotation des irrotationalen Vorticityflusses ergibt sich hier aus der Divergenzklammer und die Rotation des solenoidalen Vorticityflusses ebenso wie der Laplace der Bernoulli-Funktion aus der gemischten Klammer.

- Den einzigen Beitrag zur Höhentendenz liefert ein Permutationsterm aus der $\zeta\mu h$ -Klammer:

$$\{h, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_3} = +\Delta \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} = -\Delta\gamma = -\text{div}(h\mathbf{v}).$$

Diese Aufteilung der Terme ist in Tab. 4.2 zusammengefasst. Die Vorticityklammer entspricht der Vorticityklammer in der Nambu-Darstellung der barotropen Vorticitygleichung (Névir und Blender, 1993). Sie beschreibt den solenoidalen Anteil der Vorticityadvektion. Die Gesamtklammer wurde hier als Summe von einzelnen Klammern geschrieben. In allen Klammern kommen jedoch dieselben konstituierenden Größen vor. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zur Nambu-Darstellung des nichthydrostatischen Systems, bei der in den einzelnen Klammern verschiedene Größen das Gesamtsystem konstituieren.

	Vorticityklammer	Divergenzklammer	Gemischte Klammer
$\partial_t \zeta =$	$\underbrace{\{\zeta, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\zeta\zeta}}_{=-\text{div}(\zeta_a \mathbf{v}^\chi)}$		$+ \underbrace{\{\zeta, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_2}}_{=-\text{div}(\zeta_a \mathbf{v}^\gamma)}$
$\partial_t \mu =$		$\underbrace{\{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\mu\mu\zeta}^{\pi_3}}_{=\mathbf{k}\cdot\text{rot}(\zeta_a \mathbf{v}^\gamma)}$	$+ \underbrace{\{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_1}}_{=\mathbf{k}\cdot\text{rot}(\zeta_a \mathbf{v}^\chi)}$ $+ \underbrace{\{\mu, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_2}}_{=-\Delta\Psi}$
$\partial_t h =$			$\underbrace{\{h, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta\mu h}^{\pi_3}}_{=-\text{div}(h\mathbf{v})}$

Tabelle 4.2: Beiträge der einzelnen Teilkammern

Kapitel 5

Geometrische Integration

Bei der Simulation von Lösungen partieller sowie gewöhnlicher Differentialgleichungen müssen wegen der beschränkten Rechen- und Speicherkapazität stets Näherungen vorgenommen werden. Die Wahl einer bestimmten numerischen Methode legt letztlich fest, wie die Näherungen genau ausgeführt werden und welche Auswirkungen sie auf die unterschiedlichen Eigenschaften der betreffenden Gleichung haben. Diese Eigenschaften können grob in zwei Gruppen eingeteilt werden. Beispiele für ‚lokale‘ oder ‚quantitative‘ Eigenschaften von prognostischen partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen sind:

- Der lokale Wert der Raumableitung einer partiellen Differentialgleichung
- Der lokale Wert der Zeitableitung

Beispiele für ‚globale‘ oder ‚qualitative‘ Eigenschaften sind

- Die Erhaltungseigenschaften (z. B. Energie, Wirbelerhaltung, Impuls, Masse, Entropie)
- Die symplektische Struktur bzw. die Poisson-Struktur
- Die Volumenerhaltung im Phasenraum bzw. das Liouville-Theorem
- Diskrete und kontinuierliche Symmetrien (z. B. Zeit-Reversibilität)

All diese Eigenschaften werden in der räumlichen (für partielle Differentialgleichungen) und in der zeitlichen Diskretisierung im Normalfall nur zu einer gewissen Ordnung an Genauigkeit erhalten. Für jede dieser Eigenschaften gibt es spezielle Methoden, sie möglichst genau und effizient umzusetzen. Die Ordnung, mit der der Diskretisierungsfehler der lokalen Eigenschaften mit steigender Auflösung abnimmt, wird ‚lokale räumliche bzw. zeitliche Genauigkeit‘ genannt. Mit einem Runge-Kutta-Verfahren hoher Ordnung kann beispielsweise eine entsprechend hohe zeitliche Genauigkeit für eine gewöhnliche Differentialgleichung erreicht werden.

Verfahren, welche die letzten vier Eigenschaften speziell berücksichtigen werden unter dem Begriff ‚geometrische Integration‘ zusammengefasst. Dies gilt in speziellem Maß für

gewöhnliche, zunehmend aber auch für partielle Differentialgleichungen. Ihre Motivation ergibt sich zu einem wesentlichen Teil aus Erkenntnissen der so genannten Chaostheorie. Durch die sensible Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen ergibt sich bei nichtlinearen Systemen die Situation, dass in der Praxis exakte Lösungen kaum noch berechnet werden können. Das wird als deterministisches Chaos bezeichnet. Damit relativiert sich die Motivation, der lokalen Genauigkeit möglichst viel Gewicht beizumessen, da eine genaue Vorhersage sowieso nicht erreichbar ist. Stattdessen kann versucht werden, unter der Beachtung der letzten vier Eigenschaften, zumindest gewisse (z. B. statistische) Merkmale der Lösung richtig wiederzugeben. Als Beispiel für Anwendungen, die je einer der oben genannten Gruppen entsprechen, seien zwei Arten von Vorhersagen der atmosphärendynamischen Grundgleichungen genannt:

- Bei der Wetterprognose wird versucht, die Lösung möglichst genau zu berechnen. Dafür ist unter anderem eine hohe lokale Genauigkeit relevant.
- Bei der Klimavorhersage liegt das Interesse hingegen bei den charakteristischen, statistischen Merkmalen der simulierten Lösung. Dabei kommt der Berücksichtigung der globalen, qualitativen Eigenschaften der zugrundeliegenden Gleichung eine besonders wichtige Rolle zu.

In der Praxis werden diese Ansätze nicht strikt getrennt sondern miteinander kombiniert und die optimalste Methode hängt letztlich vom konkret zu bearbeitenden Problem ab.

5.1 Konservative räumliche Diskretisierungen

Bei Vernachlässigung der dissipativen und antreibenden Prozesse weist die Atmosphärendynamik die globalen Erhaltungsgrößen Energie, Masse, Impuls, Entropie, Drehimpuls und modellabhängige Wirbelerhaltungsgrößen (z. B. potentielle Enstrophie, Helizität) auf. Lokal gelten entsprechende Flussgleichungen. Räumliche Diskretisierungen der partiellen Differentialgleichungen geben diese Erhaltungseigenschaften im Allgemeinen nicht wieder, d. h. selbst wenn die damit verbundenen gewöhnlichen Differentialgleichungen exakt gelöst würden, ergäbe sich daraus nicht notwendigerweise die Erhaltung. Im Normalfall ist der entsprechende Fehler von derselben Ordnung wie die lokale Genauigkeit. Durch eine spezielle Wahl der Differenzenquotienten ist in besonderen Fällen jedoch auch eine exakte Erhaltung möglich. Durch die zusätzliche Bedingung sind dabei üblicherweise mehr Gitterpunkte involviert, d. h. es werden größere Stencils benötigt. Räumliche Diskretisierungsschemen, die Erhaltungsgesetzen genügen, werden ‚konservative räumliche Diskretisierungen‘ genannt.

Die Entwicklung solcher Schemen begann unmittelbar nach der Einführung numerischer Methoden in die Atmosphärendynamik, mit der auch die Entdeckung der ‚nichtlinearen numerischen Instabilität‘ verbunden ist (Phillips, 1956, 1959). Die Ursache wurde in der mangelnden numerischen Darstellung der Energie- und Enstrophieerhaltung lokalisiert und konnte durch ein speziell dafür ausgelegtes konservatives Diskretisierungsschema behoben werden (Arakawa, 1966). Allerdings ist dieses Schema auf die Verwendung der barotropen Vorticitygleichung auf homogenen Gittern beschränkt. Später wurden

solche konservativen und somit gegenüber der nichtlinearen numerischen Instabilität resistenten Diskretisierungen auch für die Flachwassergleichungen definiert (Sadourny, 1975; Arakawa und Lamb, 1981). Für Simulationen von komplexer Fluidodynamik auf sehr allgemeinen Gittern sind vorgenannte Lösungen nicht mehr angemessen und neuere Ansätze werden aktuell verfolgt (Zeitlin, 1991; McLachlan, 1999, 2003; Quispel und McLachlan, 2006). Dabei geht es nicht mehr ausschließlich um die Behebung der nichtlinearen numerischen Instabilität, sondern, wie oben beschrieben, um eine konsistente Übertragung der Gleichungsstruktur auf diskrete Modelle.

5.2 Diskretisierung auf Basis der Hamilton-Darstellung

Die Hamilton-Darstellung (Anhang A) beschreibt die qualitativen, globalen Merkmale einer Differentialgleichung besonders anschaulich. Sie bietet sich damit auch zur numerischen Modellierung dieser Eigenschaften an. Das gilt besonders für gewöhnliche Differentialgleichungen (Leimkuhler und Reich, 2004; Hairer et al., 2006), aktuell wird aber auch die Anwendung auf partielle Differentialgleichungen diskutiert (Bridges und Reich, 2006; Salmon, 2004).

Wie in Kapitel 3 dargestellt wurde, ist die Lagrangesche Fluidodynamik regulär, das heißt unter bestimmten Zusatzannahmen existieren auf der zugehörigen symplektischen Mannigfaltigkeit kanonische Koordinaten. Die Hamilton-Darstellung der Lagrange-Fluidodynamik wird z. B. bei der ‚Hamiltonian particle-mesh method‘ (HPM) verwendet (Frank et al., 2002; Frank und Reich, 2004). Die räumliche Diskretisierung ist dabei kanonisch und die Verwendung eines symplektischen Zeitintegrationsverfahrens gewährleistet eine exakte Wiedergabe der symplektischen Gleichungsstruktur.

Wegen der Wirbel-Casimire ist die Eulersche Beschreibung singulär und entspricht einem Hamilton-System auf einer Poisson-Mannigfaltigkeit. Die auftretenden Poisson-Klammern können zur energieerhaltenden Diskretisierung verwendet werden (Salmon, 2004). Damit lassen sich die erwähnten konservativen Diskretisierungen auf fast beliebige Gittertypen verallgemeinern. Die Methode ist weitgehend analog zur unten diskutierten Nambu-Diskretisierung, allerdings beschränkt auf eine einzelne Erhaltungsgröße.

5.3 Diskretisierung auf Basis der Nambu-Darstellung

Auf der Basis der Nambu-Darstellung von atmosphärendynamischen Gleichungssystemen wurde von Salmon (2005, 2007) eine allgemeine Diskretisierungsmethode (im Folgenden ‚Nambu-Diskretisierung genannt‘) vorgeschlagen, welche neben der Energie eine Wirbelgröße exakt erhält. Diese Eigenschaft bezieht sich auf die räumliche Semi-Diskretisierung, die typischerweise den größeren Anteil am Fehler verursacht als die zeitliche Diskretisierung.

An einem einfachen Beispiel wird hier das allgemeine Vorgehen bei der Nambu-Diskretisierung erläutert. Gegeben sei der eindimensionale¹ räumliche Differentialoperator

¹Die Methode ist für partielle Differentialgleichungen auf beliebigen Gebieten anwendbar, die Beschränkung auf eine Dimension dient hier der Übersichtlichkeit.

\mathbf{X} und die zugehörige partielle Differentialgleichung (PDE)

$$\partial_t z = \mathbf{X}[z].$$

Die Idee bei der Nambu-Diskretisierung ist, anstelle der direkten Diskretisierung von \mathbf{X} durch Differenzenquotienten, dem in Tab. 5.1 skizzierten Weg zu folgen. Zuerst wird für die gegebene Differentialgleichung die Nambu-Darstellung

$$\partial_t \mathcal{F} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}$$

mit den konstituierenden Erhaltungsgrößen \mathcal{H}, \mathcal{E} konstruiert. Dazu gibt kein allgemeines Verfahren, für eine Vielzahl von fluiddynamischen Systemen ist die Nambu-Form jedoch bekannt. Daraufhin werden diskrete Ausdrücke für diese konstituierenden Erhaltungsgrößen sowie für die Nambu-Klammer definiert. Dabei werden Integrale zu Summen, Funktionalableitungen zu partiellen Ableitungen und Differentialquotienten zu Differenzenquotienten. Die genaue Wahl des Schemas ist hierbei frei, für die Erhaltungseigenschaften ist letztlich nur die Antisymmetrie der diskreten Klammer ausschlaggebend. Um dies zu erreichen kann die kontinuierliche Klammer als Summe zyklischer Vertauschungen geschrieben werden:

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{E}, \mathcal{H}\} = \frac{1}{3}(\{\mathcal{F}, \mathcal{E}, \mathcal{H}\} + \{\mathcal{H}, \mathcal{F}, \mathcal{E}\} + \{\mathcal{E}, \mathcal{H}, \mathcal{F}\}). \quad (5.1)$$

Dies ist wegen der Antisymmetrieeigenschaften immer exakt möglich. Werden nun die einzelnen Terme auf der rechten Seite von 5.1 separat diskretisiert und dabei *eine* der *beiden* Antisymmetrien erhalten, ergeben sich in der derart diskretisierten Klammer wieder *beide* Antisymmetrien.

PDE	ODE
Bewegungsgleichung	Bewegungsgleichung
$\partial_t z = \mathbf{X}[z]$	$\partial_t z_i = \mathbf{X}(z)$
↓	↑
Erhaltungsgrößen	Erhaltungsgrößen
$\mathcal{H} = \int dz h(z)$	$H = \sum_i \Delta z_i h(z_i)$
$\mathcal{E} = \int dz e(z)$	$E = \sum_i \Delta z_i e(z_i)$
Nambu-Darstellung	Nambu-Darstellung
$\partial_t \mathcal{F}[z] = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}$	$\partial_t F(z) = \{F, H, E\}$
$= \int dz \mathcal{N} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta z}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta z}, \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta z} \right)$	$= \sum_i \Delta z_i N \left(\left[\frac{1}{\Delta z_i} \frac{\partial F}{\partial z_i} \right], \left[\frac{1}{\Delta z_i} \frac{\partial H}{\partial z_i} \right], \left[\frac{1}{\Delta z_i} \frac{\partial E}{\partial z_i} \right] \right)$

Tabelle 5.1: Übersicht Nambu-Diskretisierung

Zuletzt werden in die diskrete Klammer die konstituierenden Erhaltungsgrößen sowie die prognostische Größe z_i eingesetzt und der Ausdruck ausgewertet. Als Resultat ergibt sich eine gewöhnliche Differentialgleichung (ODE) mit Erhaltungseigenschaften für H und E . Im Fall von fluiddynamischen Systemen sind diese Erhaltungen dabei nicht nur global zu verstehen. Durch Integration über ein beliebig kleines Gebiet ergeben sich diskrete Analoga der lokalen Flussgleichungen

$$\begin{aligned}\partial_t h &= -\operatorname{div}(h\mathbf{v}) \\ \partial_t e &= -\operatorname{div}(e\mathbf{v}).\end{aligned}$$

Der Vergleich mit der allgemeinen Eulerschen Bilanzgleichung für die Größen $q = h, e$

$$\partial_t q + \operatorname{div}(\mathbf{v}q + \mathbf{S}_q^*) = Q_q$$

zeigt, dass in der Nambu-Diskretisierung weder Quellen oder Senken Q_q noch nichtkonvektive Terme $\operatorname{div}(\mathbf{S}_q^*)$ auftreten. Bei Verwendung von abgeleiteten Variablen wird die Energie H durch Potentiale ausgedrückt, entsprechend ergibt sich auch die Flussgleichung bezüglich dieser Potentiale. Für die potentielle Enstrophie der Flachwassergleichungen wird die Erhaltungseigenschaft in Kapitel 7 explizit nachgewiesen.

Genau wie die Diskretisierung von Poisson-Klammern (Salmon, 2004) liefert diese Methode a priori keine Möglichkeit, auch die Jacobi-Identität für die diskretisierten Gleichungen zu gewährleisten. Eine Konsequenz daraus ist, dass das Phasenraumvolumen unter einer derart konstruierten Semi-Diskretisierung nicht notwendigerweise erhalten ist (Kapitel 9). Der Fehler ist für das hier untersuchte System jedoch klein.

Kapitel 6

Das ICON-Modell

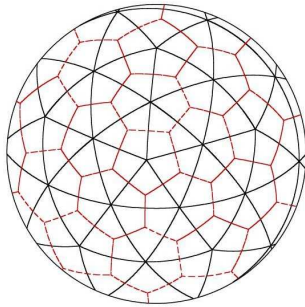
Das ICON¹-Modell ist ein Gemeinschaftsprojekt des Max-Planck-Institutes für Meteorologie und des deutschen Wetterdienstes. Das Ziel ist die Entwicklung eines allgemeinen Zirkulationsmodells, welches zur globalen sowie regionalen Klima- und Wettervorhersage verwendet werden kann. Dazu werden die voll elastischen, nichthydrostatischen Navier-Stokes-Gleichungen auf einem versetzten, geodätischen, adaptiven Gitter gelöst. Als Vorstufe dazu existiert ein Flachwasser-Prototyp (engl. Icosahedral shallow-water prototype ICOSWP), primär zur Untersuchung des horizontalen Gitters und der horizontalen Differentialoperatoren. Eine detaillierte Beschreibung des Flachwasserprototypen ist in Bonaventura und Ringler (2005) und Bonaventura et al. (2005) zu finden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde dieser Prototyp um eine Implementierung der Nambu-Diskretisierung erweitert. Da im weiteren das nichthydrostatische ICON-Modell nicht benutzt wird, werden die beiden Begriffe ICON und ICOSWP synonym verwendet.

6.1 Das ICON-Gitter

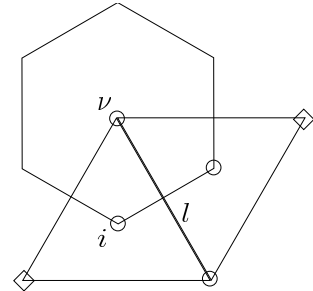
Das ICON-Gitter ist ein geodätisches Dreiecks-Gitter mit Variablenversetzung (C-type staggering). Die Dreiecks-Struktur ermöglicht dabei im Vergleich mit klassischen Rechteck-Gittern eine homogenere Verteilung der Gitterpunkte (Heikes und Randall, 1995). Für die Flachwasser-Gleichungen auf einem unversetzten geodätischen Gitter wurde in Ringler und Randall (2002) eine konservative räumliche Diskretisierung vorgeschlagen. Eine Verallgemeinerung auf C-versetzte Gitter ohne explizite Erhaltungseigenschaften findet sich in Bonaventura und Ringler (2005).

Die globale Gitterstruktur ist die eines Ikosaeders und dessen dualen Körpers, eines Dodekaeders. Diese beiden Strukturen werden gegenseitig verfeinert bis die gewünschte Auflösung erreicht ist. Es ergeben sich schließlich zwei zueinander duale Gitter, eines mit Dreiecken und das andere mit Fünf- sowie Sechsecken als Kontrollvolumen (Abb. 6.1). Die Masse, der Druck und die Divergenz sind jeweils in den Dreiecksmitten definiert, die Vorticity in den Fünf- bzw. den Sechseckmitten und die Windgeschwindigkeit senkrecht zu den Dreieckskanten. Die Notation auf dem Gitter ist in Tab. 6.1 zusammengefasst.

¹Icosahedral nonhydrostatic



(a) Das ICON-Gitter in niedriger Auflösung



(b) Das lokale Stencil: Vorticity-Punkt ν , Masse-Punkt i und Windkante l .

Abbildung 6.1: Das ICON-Gitter in niedriger Auflösung und sein lokales Stencil.

i	Massepunkt
ν	Vorticity-Punkt
l	Windkante
$N(\cdot)$	Menge der Nachbarpunkte auf dem jeweils dualen Gitter
$\mathcal{E}(\cdot)$	Menge der Kanten einer Zelle
A_i	Fläche einer Massezelle (Dreieck)
A_ν	Fläche einer Vorticity-Zelle (Fünf- bzw. Sechseck)
$A_l = \frac{1}{2}\delta_l\lambda_l$	Fläche einer Kantenzelle
λ_l	Länge einer Kante l
δ_l	Länge einer Kantennormalen l
∂_l	Differenzenquotient entlang l
∂_l^\perp	Differenzenquotient normal zu l

Tabelle 6.1: Gitterbezeichnungen

Die algebraischen Operatoren ∂_l und ∂_l^\perp wirken als Differenzenquotienten zweiter Ordnung von auf Vorticity- bzw. Massepunkten definierten Größen.

6.1.1 Eine gitterinduzierte Instabilität

Obwohl das ICON-Gitter insgesamt sehr homogen ist, gibt es Situationen, in denen die Gitterstruktur einen wesentlichen Einfluss auf die Simulation hat. Der Galewsky et al. (2004)-Test zeichnet sich durch einen zonal symmetrischen, barotrop instabilen, scherenden Jet-Stream aus. Die Instabilität wird auf dem ICON-Gitter im Vergleich zu Spektralmodellen oder Hamiltonschen Teilchenmethoden (HPM) sehr schnell ausgelöst. Mit höheren Auflösungen vermindert sich jedoch die Stärke dieses Effektes (Abb. 6.2).

Ein möglicher Grund für das Auftreten dieser Instabilität kann auch in der Verwendung der skalaren Form der Gleichungen liegen, was die numerische Umsetzung der Impulserhaltung im Advektionsterm erschwert (Hollingsworth et al., 1993). Abhängig von der Approximation der lokalen kinetischen Energie können dadurch Instabilitäten auftreten, welche sich bevorzugt an Gitterinhomogenitäten bemerkbar machen. Dafür spricht, dass die räumliche Verteilung der Fünf- und Sechsecke einer Welle-5-Struktur entspricht, obschon erfahrungsgemäß die Welle 6 bei diesem Test instabiler ist.

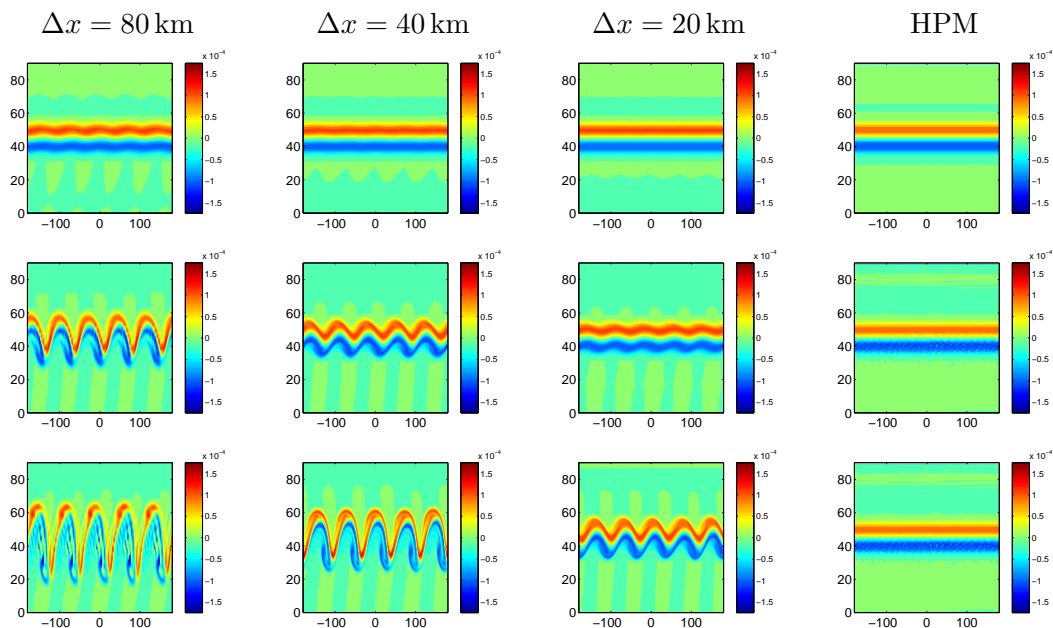


Abbildung 6.2: Vorticity am Tag 2 (oben), 4 (Mitte) und 6 (unten) (Shin et al., 2009).

6.1.2 Mittelungen auf dem ICON-Gitter

Durch die Variablenversetzung ist die Definition von Mittelungen zwischen den beiden Gittern unumgänglich. Im Flachwasser-Prototyp werden folgende Mittelbildungen verwendet:

- Mittelung von Dreiecksecken auf Dreiecksmitten

$$\bar{\alpha}_i := \frac{1}{3} \sum_{\nu \in N(i)} \alpha_\nu$$

- Mittelung von Dreiecksmitten auf Dreiecksecken

$$\bar{\alpha}_\nu := \frac{1}{A_\nu} \sum_{i \in N(\nu)} \frac{A_i}{3} \alpha_i \quad (6.1)$$

- Mittelung von Dreiecksecken oder -mitten auf Kanten

$$\bar{\alpha}_l := \frac{\alpha_l^{\circ 1} + \alpha_l^{\circ 2}}{2} \quad (6.2)$$

Der Index \circ bezieht sich dabei auf die entsprechend markierten Punkte in Abb. 6.1 (b). Es wird sich bei der Anwendung der Nambu-Diskretisierung auf diesem Gitter zeigen, dass die Wahl der Mittelung einen wesentlichen Einfluss auf Erhaltungs- und Stabilitätseigenschaften hat.

6.2 Räumliche Operatoren und Bewegungsgleichungen

Das ICON-Modell verwendet eine Finite-Volumen-Diskretisierung für den horizontalen Rotations- und Divergenzoperator:

$$\begin{aligned} \overline{\text{div}(\mathbf{v})} &= \frac{1}{A} \int_A dA \text{div}(\mathbf{v}) = \frac{1}{A} \int_{\partial A} d\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \quad \rightarrow \quad \text{div}_i(\mathbf{v}_l^\perp) = \frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \mathbf{v}_l^\perp \cdot \boldsymbol{\lambda}_l \\ \overline{\text{rot}(\mathbf{v})} &= \frac{1}{A} \int_A dA \text{rot}(\mathbf{v}) = \frac{1}{A} \int_{\partial A} d\mathbf{s} \cdot \mathbf{v} \quad \rightarrow \quad \text{rot}_\nu(\mathbf{v}_l^\perp) = \frac{1}{A_\nu} \sum_{l \in \mathcal{E}(\nu)} \mathbf{v}_l^\perp \cdot \boldsymbol{\delta}_l. \end{aligned}$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes in der Dreiecksmitte wird entsprechend dem Satz von Gauß als Fluss aus diesem Dreieck hinaus approximiert (\mathbf{n} steht hier für den Normalenvektor und \mathbf{s} für den Tangentialvektor entlang ∂A). Analog ergibt sich gemäß dem Satz von Stokes die Vertikalkomponente der Rotation in einem Sechseck oder Fünfeck als Fluss entlang der Kanten. Für die Berechnung der Rotation an den Vorticitypunkten oder der Divergenz an Massepunkten ist aufgrund der Variablenversetzung entsprechend Abb. 6.1 (b) die Kenntnis der Kantennormalgeschwindigkeiten \mathbf{v}_l^\perp ausreichend. Die lokalen Größen, die im ICON-Modell verwendet werden sind in Tab. 6.2 definiert.

Höhe	h_i
Geschwindigkeit normal zu Kante	\mathbf{v}_l^\perp
Geschwindigkeit tangential zu Kante	\mathbf{v}_l^\parallel
Vorticity	$\zeta_\nu := \text{rot}_\nu(\mathbf{v}_l^\perp)$
Divergenz	$\mu_i := \text{div}_i(\mathbf{v}_l^\perp)$
PV	$q_\nu := \frac{\zeta_\nu}{h_\nu}$

Tabelle 6.2: Lokale Größen auf dem ICON-Gitter

Prognostiziert werden die Höhe und eine Windkomponente an ihren jeweils definierten Punkten auf dem Gitter:

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{v}_l^\perp &= -(\bar{\zeta}_l + f_l) \mathbf{v}_l^\perp - \partial_t^\perp \left(\frac{1}{2} (u_i^2 + v_i^2) + gh_i \right) \\ \partial_t h_i &= -\text{div}_i(h_{\text{ave},l} \mathbf{v}_l^\perp). \end{aligned}$$

$h_{ave,l}$ ist hier die flächengewichtete Mittelung der Höhe auf die Kante. u und v sind die zonale bzw. die meridionale Windkomponente und \mathbf{v}_l^{\parallel} ist die Komponente parallel zu Kante l . Sie werden aus den prognostizierten Normalkomponenten an den Kanten mit einem geeigneten Verfahren rekonstruiert (Nicolaidis, 1992; Raviart und Thomas, 1977). Als Zeitschrittverfahren wurde hauptsächlich Leap-frog verwendet. Zur genaueren Umsetzung der Erhaltungseigenschaften wurde hier zusätzlich ein iteratives implizites Mittelpunktverfahren implementiert.

Teil II
Ergebnisse

Kapitel 7

Nambu-Diskretisierung der Flachwassergleichungen auf einem versetzten, geodätischen Gitter

In Kapitel 6 wurde das ICON-Modell beziehungsweise dessen Flachwasser-Prototyp ICOSWP vorgestellt. Die zugehörige Semi-Diskretisierung erhält explizit nur die Masse. Wie im Folgenden gezeigt wird, gibt es Situationen, in denen signifikante Fehler insbesondere bezüglich der Enstrophieerhaltung auftreten. Mit der Methode der Nambu-Diskretisierung ist es möglich, eine Semi-Diskretisierung herzuleiten, die genau diese Inkonsistenzen eliminiert. Die prinzipielle Anwendbarkeit sowie die wichtigsten Eigenschaften dieser konservativen Diskretisierung sollen in diesem Kapitel diskutiert werden. Gegenüber bestehenden Arbeiten ergibt sich als Neuerung ein Energie- und Enstrophieerhaltendes Schema für die Flachwassergleichungen auf einem versetzten, geodätischen Dreiecks-Gitter.

7.1 Methodik

Wie in Abschnitt 5.3 beschrieben, besteht die Idee von Salmon (2005, 2007) in der Verwendung der Nambu-Darstellung eines gegebenen dynamischen Systems, um numerisch die Erhaltungseigenschaften der konstituierenden globalen Größen wiederzugeben. Das Vorgehen ist für die Flachwassergleichungen in Abb. 7.1 skizziert. Die Punkte stehen dabei für die in dieser Abbildung aus Platzgründen nicht aufgeführten Klammern. Anstatt direkt die räumlichen Differentialoperatoren (7.1)–(7.3) zu diskretisieren, werden diskrete Formen der Erhaltungsgrößen (7.7)–(7.8) und der Nambu-Klammer (7.11) definiert. Schließlich ergeben sich die Bewegungsgleichungen durch Einsetzen der prognostischen Größen in die entsprechenden Klammersausdrücke. Die Erhaltungseigenschaften der so definierten Semi-Diskretisierung folgen damit aus der Art der Konstruktion. Ein expliziter Nachweis ohne Verwendung der Nambu-Darstellung wird in Abschnitt 7.3 gegeben. Reibungsterme können anschließend nach Belieben addiert werden, womit Energie und potentielle Enstrophie dissipiert wird. Im reibungsfreien Zustand ergibt sich jedoch stets

der exakt konservative Fall.

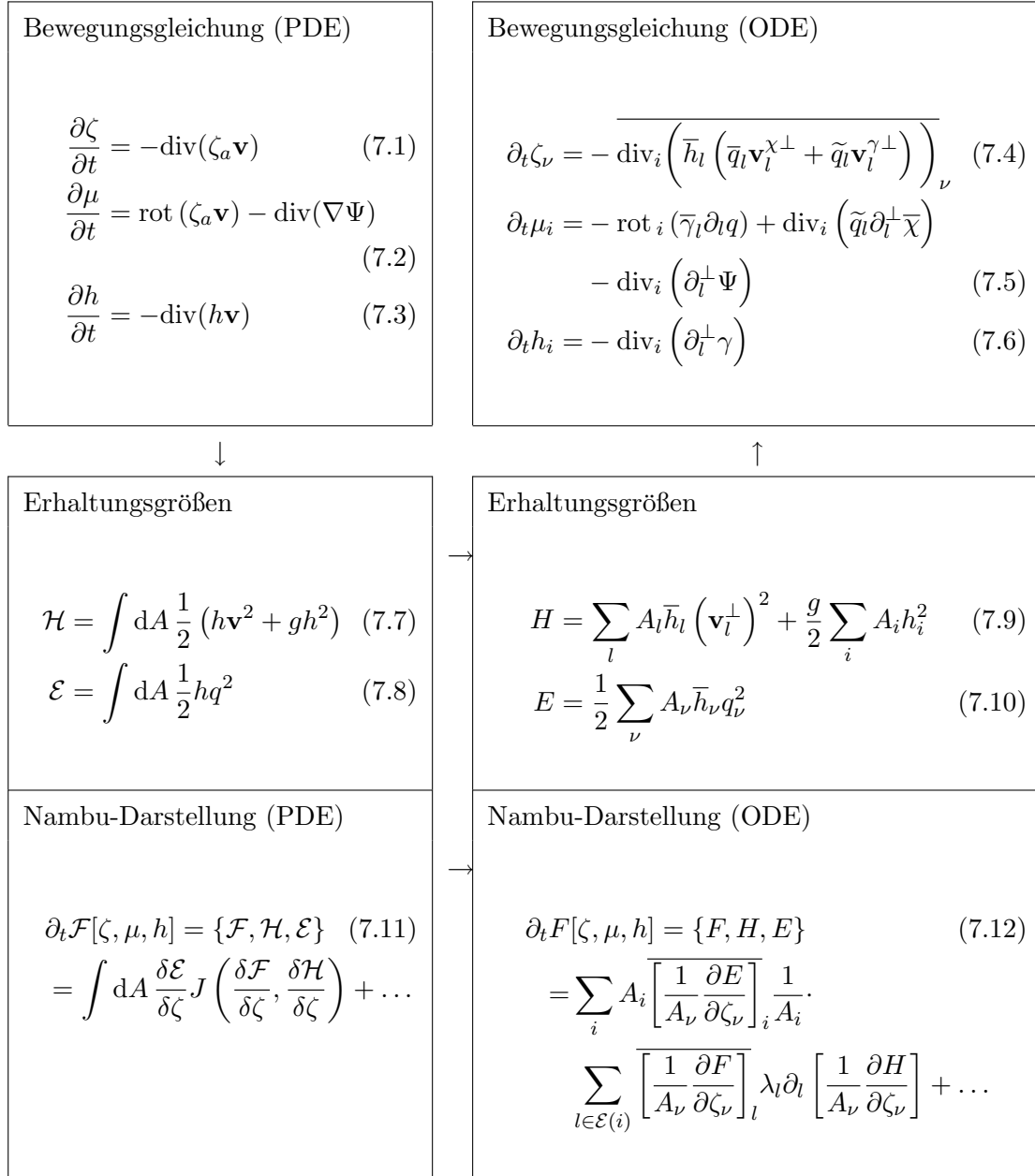


Abbildung 7.1: Übersicht Nambu-Diskretisierung für die Flachwassergleichungen

7.2 Herleitung der Nambu-Semi-Diskretisierung auf dem ICON-Gitter

Zusätzlich zu den in Kapitel 6 eingeführten, werden folgende Mittelungen definiert:

- Alternative Mittelung von Dreiecksecken auf Kanten

$$\tilde{\alpha}_l := \frac{\alpha_l^{\circ 1} + \alpha_l^{\circ 2}}{2} \quad (7.13)$$

- Mittelung von Kanten auf Dreiecksecken

$$\hat{\alpha}_i := \frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \frac{A_l}{2} \alpha_l$$

Das alternative Mittel (7.13) ist das arithmetische Mittel der nächsten Dreiecksecken, welche nicht an die Kante anschließen (in Abb. 6.1 (b) mit Quadrat markiert). Die Unterscheidung der beiden Mittelbildungen ist für die Erhaltungseigenschaften wesentlich. Zusätzlich zu den in Tab. 6.2 eingeführten Größen werden diejenigen aus Tab. 7.1 verwendet. Die kinetische Energie wird alleine aus den Normalkomponenten der Geschwindigkeiten berechnet. Dies erklärt den fehlenden Faktor $\frac{1}{2}$. Da die Orientierung der Kanten gleichmäßig in alle Richtungen verteilt ist, ergibt sich insgesamt ein isotroper Ausdruck.

Feldvariable	Gittervariable	
Stromfunktion	χ	χ_ν
Geschwindigkeitspotential	γ	γ_i
Bernoulli-Funktion	Ψ	$\Psi_i := \widehat{(\mathbf{v}_l^\perp \cdot \mathbf{v}_l^\perp)}_i + gh_i$
Potentielle Enstrophie	\mathcal{E}	$E := \frac{1}{2} \sum_\nu A_\nu \bar{h}_\nu q_\nu^2$
Kinetische Energie	\mathcal{H}_{kin}	$H_{\text{kin}} := \sum_l A_l \bar{h}_l (\mathbf{v}_l^\perp)^2$
Potentielle Energie	\mathcal{H}_{pot}	$H_{\text{pot}} = \frac{g}{2} \sum_i A_i h_i^2$

Tabelle 7.1: Zusätzliche Größen für die Nambu-Diskretisierung

Außerdem werden Stromfunktion χ_ν und Geschwindigkeitspotential γ_i des Impulses eingeführt. Damit ist analog zur analytischen Helmholtz-Zerlegung

$$h\mathbf{v} = \mathbf{k} \times \nabla \chi + \nabla \gamma$$

eine Zerlegung auf dem Gitter in solenoidalen und irrotationalen Anteil definiert:

$$\bar{h}_l \mathbf{v}_l^\perp = \underbrace{\partial_l \chi}_{=:\bar{h}_l \chi^\perp} + \underbrace{\partial_l^\perp \gamma}_{=:\bar{h}_l \gamma^\perp} \quad (7.14)$$

Die Rekonstruktion der Impulspotentiale χ und γ erfolgt, wie in Abschnitt C.2 beschrieben, in zwei Schritten:

1. Bestimme die Potentiale $\tilde{\chi}_\nu, \tilde{\gamma}_i$ des Windes. Diese sind durch

$$\mathbf{v}_l^\perp = \partial_l \tilde{\chi} + \partial_l^\perp \tilde{\gamma}$$

definiert. Sie ergeben sich aus der Lösung der beiden Poisson-Gleichungen

$$\Delta \tilde{\chi}_\nu = \zeta_\nu \quad (7.15)$$

$$\Delta \tilde{\gamma}_i = \mu_i. \quad (7.16)$$

Aus diesen Potentialen ergibt sich der Impuls:

$$\bar{h}_l \mathbf{v}_l^\perp = \bar{h}_l (\partial_l \tilde{\chi} + \partial_l^\perp \tilde{\gamma}).$$

2. Aus dem im vorherigen Schritt berechneten Impuls berechnen sich nun dessen Potentiale χ_ν, γ_i . Sie ergeben sich aus der Lösung der beiden Poisson-Gleichungen

$$\Delta \chi_\nu = \text{rot}_\nu (\bar{h}_l \mathbf{v}_l^\perp) \quad (7.17)$$

$$\Delta \gamma_i = \text{div}_i (\bar{h}_l \mathbf{v}_l^\perp). \quad (7.18)$$

Die elliptischen Gleichungen (7.15)–(7.18) werden auf dem ICON-Gitter mit einem vorkonditionierten Verfahren der konjugierten Gradienten iterativ gelöst.

7.2.1 Funktionalableitungen auf dem ICON-Gitter

Die Funktionalableitungen werden in der diskreten Formulierung durch partielle Ableitungen ersetzt:

$$\frac{\delta}{\delta \zeta} \rightarrow \frac{1}{A_\nu} \frac{\partial}{\partial \zeta_\nu}, \quad \frac{\delta}{\delta \mu} \rightarrow \frac{1}{A_i} \frac{\partial}{\partial \mu_i}, \quad \frac{\delta}{\delta h} \rightarrow \frac{1}{A_i} \frac{\partial}{\partial h_i}.$$

Diese Ausdrücke ergeben durch Auswertung der partiellen Ableitungen der konstituierenden Größen $H = H_{\text{kin}} + H_{\text{pot}}$ und E das Folgende:

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_\nu} \frac{\partial H}{\partial \zeta_\nu} &= -\chi_\nu & \frac{1}{A_\nu} \frac{\partial E}{\partial \zeta_\nu} &= \frac{\zeta_\nu}{\bar{h}_\nu} = q_\nu \\ \frac{1}{A_i} \frac{\partial H}{\partial \mu_i} &= -\gamma_i & \frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial \mu_i} &= 0 \end{aligned} \quad (7.19)$$

$$\frac{1}{A_i} \frac{\partial H}{\partial h_i} = \Psi_i \quad \frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial h_i} = -\frac{1}{2} q^2_i. \quad (7.20)$$

Die spezielle Wahl der Definition der potentiellen Enstrophie E bewirkt, dass (7.20) unabhängig von der Anzahl Ecken des Polyeders durch i ist. Dies ist unter anderem nötig für die Kürzung der Singularität in der gemischten Klammer (4.4).

7.2.2 Nambu-Klammern auf dem ICON-Gitter

Der erste Schritt hin zu einem konservativen Schema wurde im vorherigen Abschnitt durch die Definition der diskreten Ausdrücke für die Erhaltungsgrößen und deren Ableitungen unternommen. Als nächsten Schritt werden jetzt Diskretisierungen der Nambu-Klammern eingeführt.

Die $\zeta\mu h$ -Klammer

Bei der Diskretisierung der gemischten Klammer (4.4) muss sichergestellt werden, dass sich der PV-Gradient im Nenner wegekürzt, damit sich nicht aus einer scheinbaren eine echte Singularität ergibt. Dies kann durch eine angemessene Definition der Mittelungen erreicht werden. Außerdem werden die lokalen x und y -Richtungsableitungen normal zu den Dreieckskanten gewählt. Mit dieser Wahl ergibt sich für die drei Permutationsterme von (4.4) (mit π_1 - π_3 indiziert)

$$\begin{aligned}
\{F, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_1} &= \\
2 \sum_l A_l \frac{1}{\partial_l^\perp \bar{q}} &\left(\partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial F}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial H}{\partial \mu_i} \right] - \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial F}{\partial \mu_i} \right] \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial H}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \right) \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial h_i} \right] \\
\{F, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_2} &= \\
2 \sum_l A_l \frac{1}{\partial_l^\perp \bar{q}} &\left(\partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial E}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial F}{\partial \mu_i} \right] - \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial \mu_i} \right] \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial F}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \right) \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial H}{\partial h_i} \right] \\
\{F, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_3} &= \\
2 \sum_l A_l \frac{1}{\partial_l^\perp \bar{q}} &\left(\partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial H}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial \mu_i} \right] - \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial H}{\partial \mu_i} \right] \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial E}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \right) \partial_l^\perp \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial F}{\partial h_i} \right].
\end{aligned}$$

Der Faktor 2 vor den Summen berücksichtigt wieder, dass die beiden beliebigen Richtungsableitungen ∂_x und ∂_y in der kontinuierlichen Klammer (4.4) durch $2\partial_l^\perp$ ersetzt werden können. Durch die spezielle Wahl der Mittelungen und diskreten Gradienten kürzen sich die bunt markierten Faktoren genau wie in der Feldgleichung weg und die Singularität entfällt. Wegen der Antisymmetrie des Jacobi-Operators ist die Kürzungsproblematik in den blauen Faktoren identisch, d. h. wenn sie sich in der π_2 -Permutation kürzen, so gilt das auch für die π_3 -Permutation. Die Singularität in der π_1 -Permutation ist hingegen von anderer Art, und die Schwierigkeit auf einem versetzten Gitter besteht darin, mit einer einzigen Definition der Klammer (aus Symmetriegründen müssen die drei Permutationsterme ja identisch diskretisiert werden) beide Faktoren zu kürzen. Mindestens einmal muss dabei der Gradient einer Variable einen Gradienten auf dem dazu dualen Gitter kürzen. Auf dem ICON-Gitter gibt es für dieses Problem eine verhältnismäßig simple Lösung, wie anhand Abb. 7.2 erläutert wird: Der Gradient der diskreten Funktionalableitung $\frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial h_i}$ senkrecht zur (horizontalen) Kante l besteht auf dem triangulären Gitter (Abb. 7.2 (a)) aus nur zwei Summanden und kürzt sich gemäß

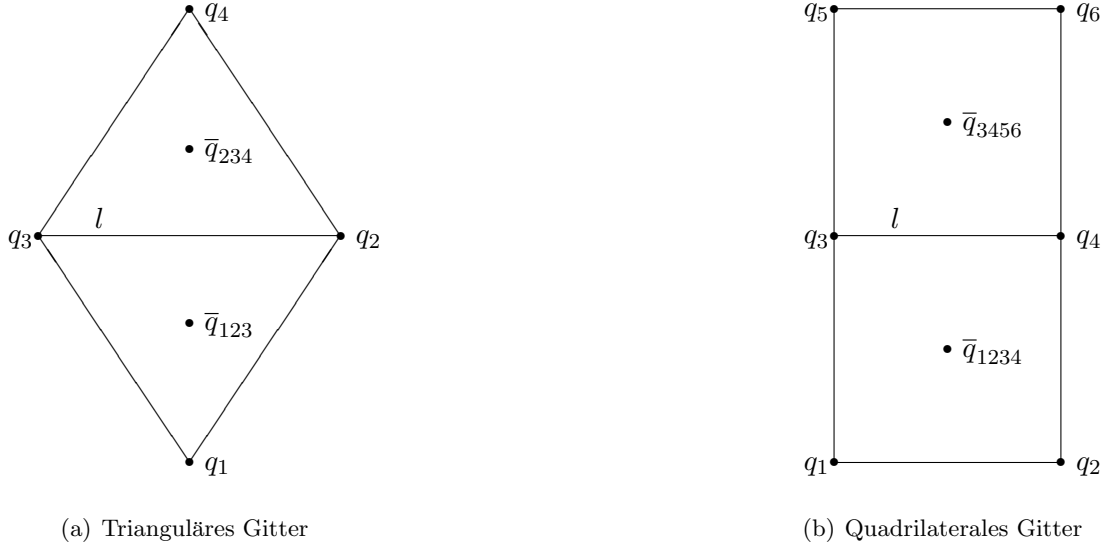


Abbildung 7.2: Kürzung auf dem Gitter

der binomischen Formel zur gemittelten PV:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial_l^\perp \frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial h_i}}{\partial_l^\perp \bar{q}} &= \frac{-\frac{1}{2} \partial_l^\perp \bar{q}_i^2}{\partial_l^\perp \bar{q}} = \frac{-\frac{1}{2} \frac{1}{\delta_l} (\bar{q}_{234}^2 - \bar{q}_{123}^2)}{\frac{1}{\delta_l} (\bar{q}_{234} - \bar{q}_{123})} \\
&= -\frac{1}{2} \frac{q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 - q_1^2 - q_2^2 - q_3^2}{q_2 + q_3 + q_4 - q_1 - q_2 - q_3} = -\frac{1}{2} \frac{q_4^2 - q_1^2}{q_4 - q_1} \\
&= -\frac{1}{2} (q_4 + q_1) = -\tilde{q}.
\end{aligned}$$

Dies entspricht der entsprechenden Kürzung in den kontinuierlichen Gleichungen:

$$\frac{\partial_x \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta h}}{\partial_x q} = \frac{\partial_x (-\frac{1}{2} q^2)}{\partial_x q} = \frac{-q \partial_x q}{\partial_x q} = -q.$$

Auf einem quadrilateralen Gitter (Abb. 7.2 (a)) hingegen ergibt sich kein polynomialer Ausdruck:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial_l^\perp \frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial h_i}}{\partial_l^\perp \bar{q}} &= \frac{-\frac{1}{2} \partial_l^\perp \bar{q}_i^2}{\partial_l^\perp \bar{q}} = \frac{-\frac{1}{2} \frac{1}{\delta_l} (\bar{q}_{3456}^2 - \bar{q}_{1234}^2)}{\frac{1}{\delta_l} (\bar{q}_{3456} - \bar{q}_{1234})} \\
&= -\frac{1}{2} \frac{q_3^2 + q_4^2 + q_5^2 + q_6^2 - q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 - q_4^2}{2 q_3 + q_5 + q_5 + q_6 - q_1 - q_2 - q_3 - q_4} \\
&= -\frac{1}{2} \frac{q_5^2 + q_6^2 - q_1^2 - q_2^2}{2 q_5 + q_6 - q_1 - q_2}. \tag{7.21}
\end{aligned}$$

Der Term (7.21) ist zwar auch eine Approximation der PV, jedoch eine denkbar schlechte. In Situationen, in denen der PV-Gradient klein wird, was in diesem Modell ohne

Weiteres vorkommen kann, werden dadurch sehr große Fehler erzeugt. Dies erklärt die spezielle Wahl der Diskretisierung der potentiellen Enstrophie und der gemischten Klammer. So kürzt sich in allen Termen der Nenner weg und es ergibt sich mit eingesetzten Funktionalableitungen der Energie und potentiellen Enstrophie:

$$\begin{aligned} \{F, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_1} &= -2 \sum_l A_l \left(\partial_l^\perp \frac{\delta F}{\delta \mu} \partial_l^\perp \bar{\chi}_i - \partial_l^\perp \gamma \partial_l^\perp \frac{\delta F}{\delta \zeta_i} \right) \underbrace{\frac{1}{\partial_l^\perp \bar{q}_i} \partial_l^\perp \left(\frac{1}{2} \bar{q}_i^2 \right)}_{=\bar{q}_i} \\ \{F, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_2} &= -2 \sum_l A_l \left(\begin{array}{c} - \partial_l^\perp \frac{\delta F}{\delta \mu} \underbrace{\frac{1}{\partial_l^\perp q_\nu} \partial_l^\perp q_\nu}_{=1} \end{array} \right) \partial_l^\perp \Psi \\ \{F, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_3} &= 2 \sum_l A_l \left(\begin{array}{c} \partial_l^\perp \gamma \underbrace{\frac{1}{\partial_l^\perp q_\nu} \partial_l^\perp q_\nu}_{=1} - \end{array} \right) \partial_l^\perp \frac{\delta F}{\delta h}. \end{aligned}$$

Die restlichen Klammern weisen keine Singularitäten auf und können daher weitaus allgemeiner diskretisiert werden.

Die $\zeta\zeta\zeta$ -Klammer

Der Jacobi-Operator kann durch die Rotation als Finite-Volumen-Operator ausgedrückt werden:

$$J(\alpha, \beta) = \mathbf{k} \cdot \text{rot}(\alpha \nabla \beta) \rightarrow J(\alpha, \beta)_i = \frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_l \bar{\alpha}_l \partial_l \beta.$$

Damit ergibt sich für die Vorticity-Klammer (4.2) der folgende Ausdruck:

$$\{F, H, E\}_{\zeta\zeta\zeta} = \sum_i A_i \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial E}{\partial \zeta_\nu} \right]_i \frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial F}{\partial \zeta_\nu} \right]_l \lambda_l \partial_l \left[\frac{1}{A_\nu} \frac{\partial H}{\partial \zeta_\nu} \right].$$

Dies ist bereits zweifach antisymmetrisch wie benötigt. Im Gegensatz dazu muss bei der Diskretisierung auf einem quadrilateralen Gitter eine Antisymmetrisierung durch die Summation von zyklischen Permutationen vorgenommen werden. Jeder Summand entspricht dabei einem Term im Arakawa-Jacobian (Arakawa, 1966).

Die $\mu\mu\zeta$ -Klammer

Auf den Fünf- und Sechsecken kann der normale Rotations-Operator für die Diskretisierung des Jacobians verwendet werden:

$$J(\alpha, \beta) = \mathbf{k} \cdot \text{rot}(\alpha \nabla \beta) \rightarrow J(\alpha, \beta)_\nu = \text{rot}_\nu(\bar{\alpha}_l \partial_l \beta) = \frac{1}{A_\nu} \sum_{l \in \mathcal{E}(\nu)} \delta_l \bar{\alpha}_l \partial_l^\perp \beta.$$

Für die erste Permutation der Divergenz-Klammer (4.3) ergibt sich damit

$$\{F, H, E\}_{\mu\mu\zeta}^{\pi_1} = \sum_{\nu} A_{\nu} \left[\frac{1}{A_{\nu}} \frac{\partial E}{\partial \zeta_{\nu}} \right] \frac{1}{A_{\nu}} \sum_{l \in \mathcal{E}(\nu)} \overline{\left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial F}{\partial \mu_i} \right]_l} \delta_l \partial_l^{\perp} \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial H}{\partial \mu_i} \right].$$

Die anderen beiden Permutationen sind gleich Null, da die potentielle Enstrophie nicht von der Divergenz abhängt.

7.2.3 Resultierende Operatoren und Bewegungsgleichungen

In einem letzten Schritt werden nun die prognostischen Größen ζ_{ν} , μ_i und h_i an ihren jeweiligen Gitterpunkten zusammen mit den Funktionalableitungen in die diskretisierten Klammern eingesetzt. Damit ergeben sich schließlich die konservativen Prognosegleichungen.

Vorticity-Gleichung

Mit $F = \zeta_{\nu}$ ergibt sich in der Vorticity-Klammer

$$\{\zeta_{\nu}, H, E\}_{\zeta\zeta\zeta} = -\overline{\operatorname{div}_i \left(\bar{q}_l \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\chi\perp} \right)_{\nu}},$$

und in der gemischten Klammer

$$\{\zeta_{\nu}, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_1} = -\overline{\operatorname{div}_i \left(\tilde{q}_l \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma\perp} \right)_{\nu}}.$$

Offensichtlich wird für die solenoidale und die irrotationale Flusskomponente eine verschiedene PV-Mittelung verwendet.

Divergenz-Gleichung

Für $F = \mu_i$ ergibt sich

$$\{\mu_i, H, E\}_{\mu\mu\zeta} = -\frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_l \partial_l q \bar{\gamma}_l = -\operatorname{rot}_i (\bar{\gamma}_l \partial_l q) \quad (7.22)$$

$$\{\mu_i, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_1} = \frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_l \tilde{q}_l \partial_l^{\perp} \bar{\chi} = \operatorname{div}_i \left(\tilde{q}_l \partial_l^{\perp} \bar{\chi} \right) \quad (7.23)$$

$$\{\mu_i, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_2} = -\frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_l \partial_l^{\perp} \Psi = -\operatorname{div}_i \left(\partial_l^{\perp} \Psi \right),$$

wobei die Rotation auf Dreiecken wie folgt definiert ist:

$$\operatorname{rot}_i (\bar{\gamma}_l \partial_l q) := \frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_l \partial_l q \bar{\gamma}_l. \quad (7.24)$$

Genau wie im vorherigen Abschnitt werden auch hier andere Mittelungen für den solenoidalen und den irrotationalen Anteil des Flusses verwendet.

Kontinuitätsgleichung

Einsetzen der Höhe h_i in die gemischte Klammer ergibt

$$\{h_{i_0}, H, E\}_{\zeta\mu h}^{\pi_3} = -\frac{1}{A_i} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_l \partial_l^\perp \gamma = -\operatorname{div}_i \left(\partial_l^\perp \gamma \right) = -\operatorname{div}_i \left(\bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma \perp} \right).$$

Dieser Ausdruck entspricht dem üblichen Ausdruck für die Kontinuitätsgleichung und erhält damit auch die Masse.

7.2.4 Vorhersageprozess

Zusammengefasst ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\partial_t \zeta_\nu = -\operatorname{div}_i \left(\overline{\bar{h}_l \left(\bar{q}_l \mathbf{v}_l^{\chi \perp} + \tilde{q}_l \mathbf{v}_l^{\gamma \perp} \right)} \right)_\nu \quad (7.25)$$

$$\partial_t \mu_i = -\operatorname{rot}_i \left(\bar{\gamma}_l \partial_l q \right) + \operatorname{div}_i \left(\tilde{q}_l \partial_l^\perp \bar{\chi} \right) - \operatorname{div}_i \left(\partial_l^\perp \Psi \right) \quad (7.26)$$

$$\partial_t h_i = -\operatorname{div}_i \left(\bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma \perp} \right). \quad (7.27)$$

In dieser Schreibweise wird als einziger neuer Operator die Rotation auf Dreiecken (7.24) benötigt. Alle anderen Änderungen gegenüber dem ICON-Flachwasser-Prototypen können durch die Mittelungen ausgedrückt werden. Die Vorticity-Gleichung entspricht in ihrer Form direkt der partiellen Vorticity-Gleichung (2.10). Unter Verwendung von

$$-\operatorname{rot}(\gamma \nabla q) + \operatorname{div}(q \nabla \chi) = \operatorname{rot}(\zeta_a \mathbf{v}),$$

wird klar, dass die Divergenzgleichung (7.26) auch eine sinnvolle Näherung der partiellen Divergenzgleichung (2.11) ist. Dasselbe gilt wie bereits bemerkt auch für die Kontinuitätsgleichung. Auf dieser Semi-Diskretisierung aufbauend kann ein numerisches Modell der Flachwassergleichungen implementiert werden. Zu einem bestimmten Zeitpunkt im Vorhersageprozess werden dabei folgende Schritte ausgeführt:

1. Rekonstruiere aus der Vorticity ζ_ν , der Divergenz μ_i und der Höhe h_i die Stromfunktion χ_ν , das Geschwindigkeitspotential γ_i und die zugehörigen Geschwindigkeitskomponenten $\mathbf{v}_l^{\chi \perp}$ und $\mathbf{v}_l^{\gamma \perp}$ (7.14).
2. Berechne die Tendenzen gemäß (7.25)–(7.27).
3. Führe einen Zeitschritt aus. (Leap-frog oder die implizite Mittelpunkregel werden verwendet.)

Zwei Nachteile dieses Schemas sind offensichtlich:

- Die Verwendung der Vorticity-Divergenz-Form macht die Lösung von vier elliptischen Problemen in jedem Zeitschritt nötig.

- Das verhältnismäßig große Stencil erschwert die Definition eines effizienten impliziten Zeitintegrationsverfahrens.

Allerdings ist mit diesem Schema keine Vektorrekonstruktion für die zweite Geschwindigkeitskomponente nötig, da alle Tendenzen durch die skalaren Potentiale ausgedrückt werden können. Die Semi-Diskretisierung (7.25)–(7.27) wird im Folgenden kurz ‚Nambu-Schema‘ genannt.

7.3 Flussform der potentiellen Enstrophie

Aus der Art der Konstruktion ergibt sich, dass das Nambu-Schema auch wieder eine Nambu-Darstellung ist, welches sich im Wesentlichen durch seine Antisymmetrieeigenschaften auszeichnet. Das Resultat ist daher analog zum Ergebnis auf der Basis von ‚Skew-gradient systems‘ (McLachlan, 2003). Die Herleitung gestaltet sich mit der Nambu-Diskretisierung jedoch wesentlich einfacher.

Für die partiellen Gleichungen resultieren die Erhaltungseigenschaften durch Einsetzen der prognostischen Gleichungen in die Tendenz der potentiellen Enstrophie. So ergibt sich ein Integral über eine Divergenz, welches bei geeigneten Randbedingungen (z. B. auf der Sphäre) verschwindet:

$$\partial_t \mathcal{E} = \frac{1}{2} \int dA \partial_t (hq^2) = \frac{1}{2} \int dA q (2q \partial_t \zeta - q \partial_t h) = -\frac{1}{2} \int dA \operatorname{div} (hq^2 \mathbf{v}) = 0.$$

Lokal gilt entsprechend die Flussgleichung $\partial_t (hq^2) = -\operatorname{div} (hq^2 \mathbf{v})$. In semidiskreter Notation kann die entsprechende Aussage für ein bestimmtes Schema unabhängig vom Konstruktionsalgorithmus nachgewiesen werden, indem gezeigt wird, dass die lokale Enstrophietendenz die Divergenz des Enstrophieflusses ist, welcher in der globalen Summe (7.28) verschwindet:

$$\begin{aligned} \partial_t E &= \frac{1}{2} \sum_{\nu} A_{\nu} \partial_t (\bar{h}_{\nu} q_{\nu}^2) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\nu} A_{\nu} q_{\nu} (2\partial_t \zeta_{\nu} - q_{\nu} \partial_t \bar{h}_{\nu}) \end{aligned} \quad (7.28)$$

$$\text{mit } \partial_t \bar{h}_{\nu} = \overline{(\partial_t h_i)}_{\nu} = \overline{-\operatorname{div}_i (\bar{h}_i \mathbf{v}_i^{\perp})}_{\nu}.$$

Dies wird hier für die Nambu-Diskretisierung explizit gezeigt:

Lemma. *Das Nambu-Schema (7.25)–(7.27) erhält die potentielle Enstrophie*

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\nu} A_{\nu} \bar{h}_{\nu} q_{\nu}^2$$

exakt, d. h. $\partial_t E = 0$.

Beweis: Es wird gezeigt, dass die lokale Tendenz der potentiellen Enstrophie nur von den orientierten Kanten dieser Zelle abhängt und sich damit für benachbarte Zellen ν_1, ν_2 mit gemeinsamer Kante l zu Null summiert:

$$[\partial_t (A_{\nu_1} \bar{h}_{\nu_1} q_{\nu_1}^2)]_l = - [\partial_t (A_{\nu_2} \bar{h}_{\nu_2} q_{\nu_2}^2)]_l. \quad (7.29)$$

Daraus folgt dann die globale Erhaltung. Es gilt

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{1}{2} A_\nu \bar{h}_\nu q_\nu^2 \right) &= \partial_t \left(\frac{1}{2} A_\nu \frac{(\zeta_\nu + f_\nu)^2}{\bar{h}_\nu} \right) \\ &= \underbrace{-\frac{1}{3} q_\nu \sum_{i \in N(\nu)} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_i \bar{q}_i \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\chi^\perp}}_{=:A} \underbrace{-\frac{1}{3} q_\nu \sum_{i \in N(\nu)} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_i \tilde{q}_i \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp}}_{=:B} + \underbrace{\frac{1}{6} q_\nu^2 \sum_{i \in N(\nu)} \sum_{l \in \mathcal{E}(i)} \lambda_i \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp}}_{=:C}. \end{aligned}$$

Term A kommt aus dem solenoidalen Teil der Vorticity-Gleichung (7.25) und kann folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$A = -\frac{1}{3} q_\nu \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} \lambda_l \bar{q}_l \partial_l \chi = -\frac{1}{2} \sum_{l \in \mathcal{E}(\nu)} \delta_l \left(2\bar{q}_l^2 - \bar{q}_l^2 \right) \partial_l^\perp \bar{\chi}. \quad (7.30)$$

$\mathcal{E}^2(\nu)$ steht für die Menge der nächsten Kanten des Gitterpunktes ν , welche nicht dort beginnen. Ausdruck (7.30) erfüllt die Bedingung (7.29) offensichtlich. Für den irrotationalen Teil der Vorticity-Gleichung B ergibt sich

$$\begin{aligned} B &= -\frac{1}{3} q_\nu \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} \lambda_l \tilde{q}_l \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp} \\ &= -\frac{1}{3} \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} \lambda_l \tilde{q}_l^2 \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp} + \frac{1}{2} \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} A_l \partial_l^\perp \bar{q}_l^2 \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Schließlich gilt für den Term C aus der Kontinuitätsgleichung

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{6} q_\nu^2 \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} \lambda_l \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp} \\ &= \frac{1}{6} \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} \lambda_l \bar{q}_l^2 \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp} - \frac{1}{2} \sum_{l \in \mathcal{E}^2(\nu)} A_l \partial_l^\perp \bar{q}_l^2 \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Die ersten Terme von (7.31) und (7.32) erfüllen die Bedingung (7.29) separat und die zweiten Terme heben sich gegenseitig auf. \square

Um die Analogie zum analytischen Ausdruck aufzuzeigen, kann die Summe als lokale Flussgleichung

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{1}{2} A_\nu \bar{h}_\nu q_\nu^2 \right) &= A + B + C \\ &= \frac{A_\nu}{2} \left(\text{rot}_\nu \left(\left(2\bar{q}_l^2 - \bar{q}_l^2 \right) \partial_l^\perp \bar{\chi} \right) - \overline{\text{div}_i \left(\left(2\tilde{q}_l^2 - \tilde{q}_l^2 \right) \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp} \right)} \right) \end{aligned}$$

geschrieben werden. Mit

$$\text{rot}(q^2 \nabla \chi) = -\text{div}(q^2 h \mathbf{v}^\chi)$$

wird klar, dass lokal die Tendenz von hq^2 tatsächlich eine Divergenz ist. Durch Integration über einen beliebigen Ausschnitt Γ kann ein diskretes Gauß/Stokes-Theorem formuliert werden:

$$\partial_t \frac{1}{2} \sum_{\nu \in \Gamma} A_\nu \bar{h}_\nu q_\nu^2 = \frac{1}{2} \sum_{l \in \partial \Gamma} \lambda_l \left((2\bar{q}_l^2 - \bar{q}^2_l) \partial_l^\perp \bar{\chi} - (2\tilde{q}_l^2 - \tilde{q}^2_l) \bar{h}_l \mathbf{v}_l^{\gamma^\perp} \right).$$

Es wird also nicht nur global keine potentielle Enstrophie produziert, sondern es gilt auch lokal für jedes beliebige Gebiet Γ mit Rand $\partial \Gamma$ eine entsprechende Aussage. Das bedeutet, dass in dieser Semi-Diskretisierung keine Quellen, Senken oder nichtkonvektive Flüsse für die potentielle Enstrophie vorkommen.

7.4 Numerische Experimente mit dem Nambu-Schema

In diesem Abschnitt werden Experimente mit dem ICON-Flachwasser-Prototypen ‚icoswp_v1-1‘ (ICOSWP) und dem um das Nambu-Schema erweiterten Programm miteinander verglichen. Ein drittes Schema, welches ebenfalls die Vorticity-Divergenz-Form der Gleichungen verwendet, jedoch nicht explizit konservativ ist, wurde auch getestet. Es ergab sehr ähnliche Resultate wie das ICOSWP-Schema und wird deswegen nicht dargestellt. Als Anfangsbedingungen wurden folgende Zustände gewählt:

- ‚Schwerewelle‘: Ruhende Atmosphäre, Höhenauslenkung in Gaußform am Pol.
- ‚Rossby-Welle‘: Test 6 nach Williamson et al. (1992).
- ‚Weißes Rauschen‘: $h = 350 \text{ m} \pm 100 \text{ m}$; $\zeta, \mu = \pm 5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ nach Bonaventura und Ringler (2005).

Die mittlere Kantenlänge betrug ca. 160 km, was einer Auflösung von ca. 1° entspricht.

7.4.1 Rossby-Welle

Abb. 7.3 zeigt das generelle Verhalten der beiden Schemen am Beispiel der Rossby-Welle. Speziell mit dem ICOSWP-Schema ergeben sich nach zehn Tagen leichte Asymmetrien (Abb. 7.3 (a)). Diese führen wie auch in anderen Modellen (Thuburn und Li, 2000) zu einem Zerfall der Welle in einen zonaleren Zustand. Der Übergang erfolgt etwas später auch mit dem Nambu-Schema (Abb. 7.3 (b)). Beide Schemen sind damit offensichtlich in der Lage, die Rossby-Mode wiederzugeben.

7.4.2 Erhaltungs- und Stabilitätseigenschaften

Für das Nambu-Schema wurde in Abschnitt 7.3 gezeigt, dass die lokale Tendenz der potentiellen Enstrophie die Divergenz eines Flusses ist. Für das ICON-Schema ist das jedoch nicht der Fall. In Abb. 7.4 ist die potentielle Enstrophie sowie die Summe der

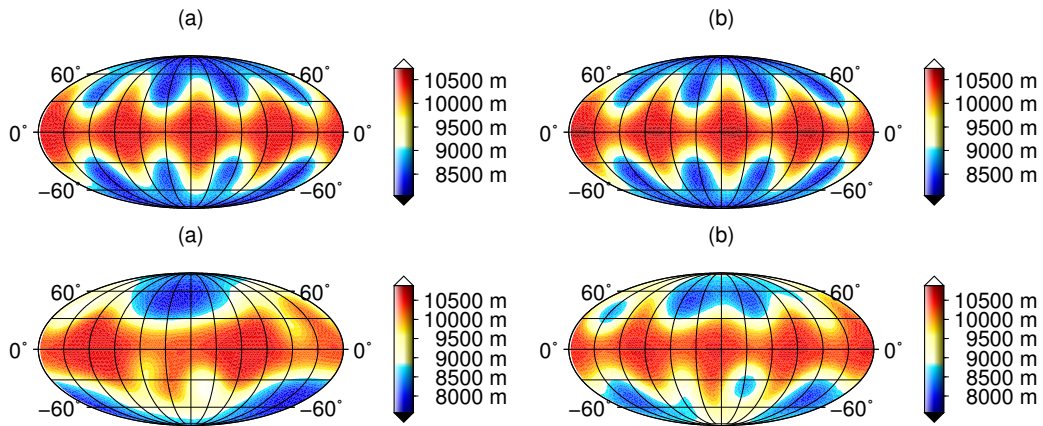


Abbildung 7.3: Höhenfeld nach 10 (oben) und 16 (unten) Tagen. (a): ICOSWP; (b): Nambu. Anfangsbedingung: Rossbywelle.

lokalen Tendenzen aus Gleichung (7.28) über der Zeit dargestellt. Sofern nicht anders erwähnt, sind im Folgenden stets bezüglich des Anfangszustandes normierte Bilanzen $\frac{E(t)-E(t_0)}{E(t_0)}$ dargestellt. Es ist erkennbar, dass diese Summe tatsächlich der Tendenz der gesamten potentiellen Enstrophie entspricht. Für den hier getesteten Fall einer Schwerewelle ergeben sich im ICON-Modell lediglich leichte Oszillationen. Mit dem Nambu-Schema zeigt sich exakte Erhaltung. Die Summe (7.28) ist algebraisch, d. h. bis auf Maschinengenauigkeit Null. In Bonaventura und Ringler (2005) wird festgestellt, dass

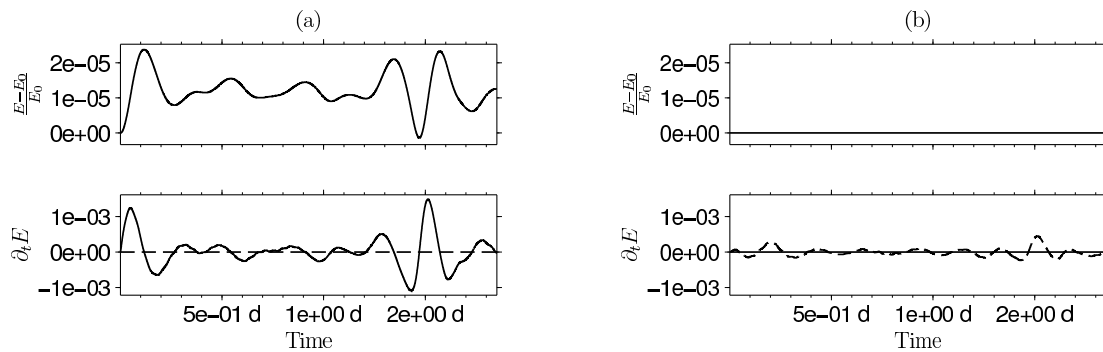


Abbildung 7.4: Oben: Relative Variation der potentiellen Enstrophie. Unten: Summen der lokalen Enstrophietendenzen gemäß (7.28) (ausgezogen) sowie (7.33) (gestrichelt). (a): ICOSWP; (b): Nambu. Anfangsbedingung: Schwerewelle.

auch das ICON-Schema in gewissem Sinn konservativ ist: Tatsächlich ergibt auch die

Summe

$$\partial_t E^* = \frac{1}{2} \sum_{\nu} A_{\nu} q_{\nu} (2\partial_t \zeta_{\nu} - q_{\nu} \partial_t h_{\nu}) \quad (7.33)$$

$$\text{mit } \partial_t h_{\nu} = -\text{div}_{\nu}(\bar{h}_l \mathbf{v}_l). \quad (7.34)$$

Null. Der Wert dieser Summe ist als gestrichelte Linie in Abb. 7.4 miteingetragen. Jedoch ist die hier eingesetzte Kontinuitätsgleichung (7.34) auf den Dreiecksflächen keine prognostische Gleichung, die in dem Schema verwendet wird, sondern eine zusätzlich eingefügte prognostische Größe, die nur auf unversetzten Gittern mit der Gleichung für h übereinstimmt. Aus diesem Grund gilt die Erhaltung der potentiellen Enstrophie im ICOSWP-Schema nicht exakt. Tatsächlich bleibt, wie unten gezeigt wird, die Differenz $E - E^*$ zwischen den beiden Ausdrücken nicht einmal klein. Dies ist unabhängig von der Art der zeitlichen Diskretisierung, da bereits das räumliche Schema in einer nicht-konservativen Form vorliegt. Diesen Nachteil weist das Nambu-Schema nicht auf (Abb. 7.4 (b)). Aus diesem Experiment, sowie obiger Argumentation folgt, dass die räumliche Diskretisierung des ICON-Schemas im Gegensatz zur Nambu-Diskretisierung, lokale Quellen und Senken der potentiellen Enstrophie aufweist. Diese Aussage gilt unabhängig vom verwendeten Zeitintegrationsverfahren. Die Konsequenzen werden im Folgenden erläutert.

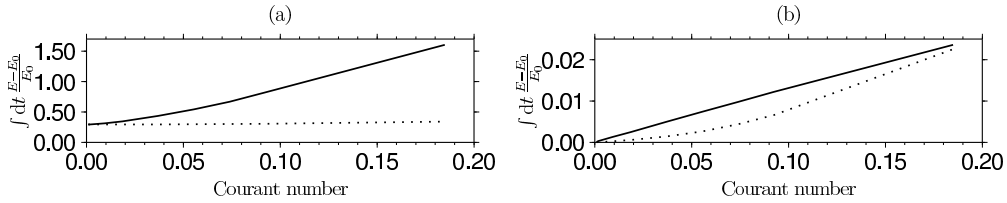


Abbildung 7.5: Relativer Fehler der aufsummierten potentiellen Enstrophie gegen Zeitschrittgröße in Courant-Einheiten ohne (ausgezogen) und mit (gepunktet) Asselin-Filter. (a): ICOSWP-; (b): Nambu-Schema. Leap-frog-Verfahren. Anfangsbedingung: Rossby-Welle.

Die Rolle des Zeitschrittalgorithmus zeigt sich bei einem Vergleich mit verschiedenen zeitlichen Auflösungen. In Abb. 7.5 ist der relative Fehler der aufsummierten potentiellen Enstrophie gegen die Zeitschrittgröße aufgetragen. Auch mit einem sehr kleinen Zeitschritt wird der Fehler des ICOSWP-Schemas nicht kleiner als ein bestimmter (durch die erwähnte Inkonsistenz des räumlichen Schemas verursachter) Wert. Der Fehler des Nambu-Schemas ist hingegen um rund zwei Größenordnungen kleiner und geht linear mit dem Zeitschritt gegen Null. Entsprechend ist der lokale zeitliche Fehler von zweiter Ordnung, was der Genauigkeit des hier verwendeten Leap-frog-Zeitintegrationsschemas entspricht. Mit Verwendung eines symmetrischen Zeitintegrationsverfahrens läßt sich dieser Fehler weiter verringern.

Durch Hinzunahme von Reibungstermen der Form $\nu \Delta \mathbf{v}$ ist das System nicht mehr konservativ und Energie wird dissipiert (Abb. 7.6). Das Nambu-Schema gibt dennoch

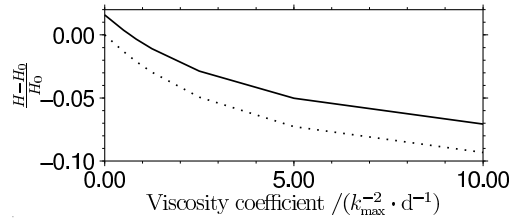


Abbildung 7.6: Energieverlust nach zwei Tagen gegen Viskositätskoeffizient für das ICOSWP- (ausgezogen) und das Nambu- (gepunktet)-Schema. Anfangsbedingung: Weißes Rauschen.

sehr gut die Eigenschaft des kontinuierlichen Modells wieder, im reibungsfreien Fall konservativ zu sein. Für das ICON-Schema gilt das hingegen nicht: Die inverse Energiekaskade wird nicht angemessen dargestellt, was hier einer Zufuhr von Energie ins System entspricht. Für ausreichend kleine Viskositätsparameter übertrifft dieser Effekt sogar den der Dissipation und führt zu einer Netto-Energiezunahme. Die Ansammlung von kinetischer Energie am untersten Ende des aufgelösten Spektrums kann schließlich zur nichtlinearen numerischen Instabilität führen (Abb. 7.7).

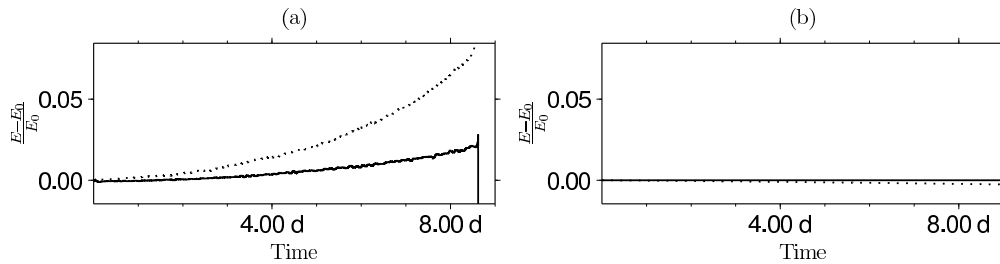
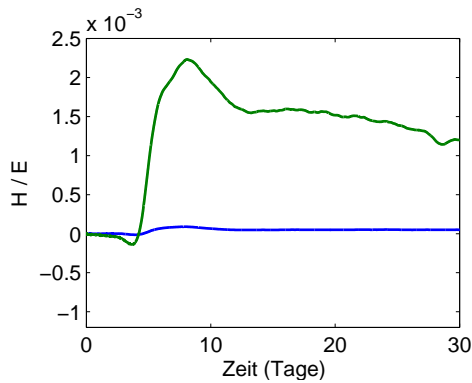
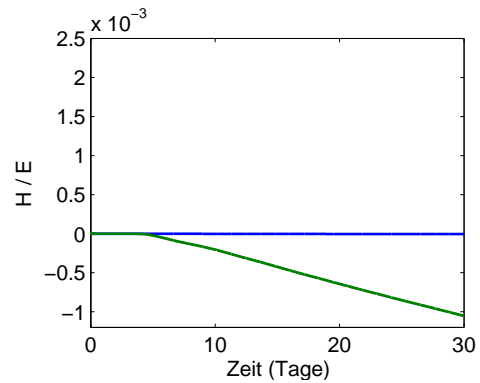


Abbildung 7.7: Gesamtenergie (gepunktet) und potentielle Enstrophie (ausgezogen) für das ICON- (a) und das Nambu- (b) Schema. Anfangsbedingung: Weißes Rauschen.

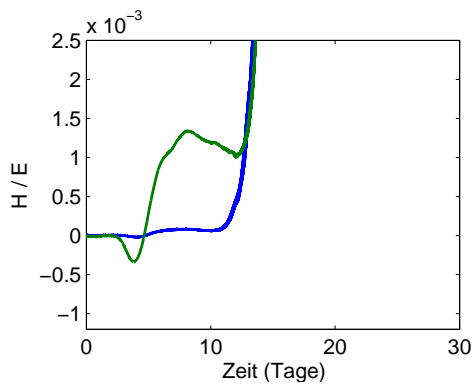
Bei der Verwendung des Leap-frog-Zeitintegrationsverfahren ist die Anwendung eines Filters (hier Asselin) zur Unterdrückung der rechnerischen Mode unerlässlich. Dieser Filter entspricht einer schwachen numerischen Dissipation. Oft fällt dadurch eine allenfalls vorhandene nichtlineare Instabilität nicht auf, da sie durch die Filterung gleich mit entfernt wird. Dies trifft beispielsweise auf Abb. 7.8 (a) zu. Die Verwendung von symmetrischen Zeitintegrationsverfahren eliminiert auch die rechnerische Mode und damit die Notwendigkeit einer Filterung. Wird damit eine reibungsfreie Simulation durchgeführt, zeigt sich die vorher durch den Asselin-Filter ‚versteckte‘ nichtlineare Instabilität (Abb. 7.8 (c)). Das Nambu-Schema zeichnet sich demgegenüber durch sehr hohe Stabilität aus. Bei der Kombination mit dem Leap-frog-Verfahren ist die Dissipation durch den Asselin-Filter deutlich zu erkennen (Abb. 7.8 (b)). Bei der Verwendung mit dem symmetrischen Verfahren (Abb. 7.8 (d)) offenbart sich die Stärke dieses Schemas.



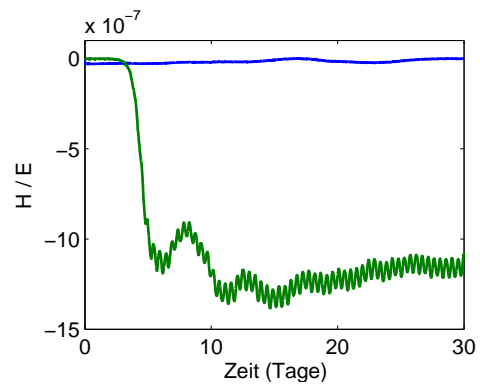
(a) ICON-Schema mit Leap-frog und Asselin-Filter



(b) Nambu-Schema mit Leap-frog und Asselin-Filter



(c) ICON-Schema mit impliziter Mittelpunkregel



(d) Nambu-Schema mit impliziter Mittelpunkregel

Abbildung 7.8: Relative Energie- (blau) und Enstrophie- (grün) Bilanzen mit der impliziten Mittelpunkregel

7.4.3 Spektralanalysen

Um das Verhalten eines bestimmten Diskretisierungsschemas im Umgang mit Strukturen auf sehr kleinen Skalen zu testen, wurden von Ringler und Randall (2002) sowie Bonaventura und Ringler (2005) sogenannte ‚Decaying turbulence tests‘ vorgeschlagen. Als Anfangsbedingung ist dabei weißes Rauschen gegeben und das System wird mit schwacher Reibung über einen längeren Zeitraum (hier 20 Tage) integriert, bis die inverse Energiekaskade ein stationäres Spektrum erzeugt. Für die inkompressible, zweidimensionale Dynamik gibt es dazu theoretische Ansätze von Kolmogorov (1941) und Salmon (1998). Unter der Annahme eines hinreichend großen spektralen Trägheitsbereiches (Bereich ohne Anregung und Dissipation) ergibt eine Dimensionsanalyse der kaskadierenden Größen ein $k^{-\frac{5}{3}}$ -Verhalten für die großen und ein k^{-3} -Verhalten für die kleinen Skalen. Trotz der einschränkenden Annahmen können diese Resultate einen ungefähren

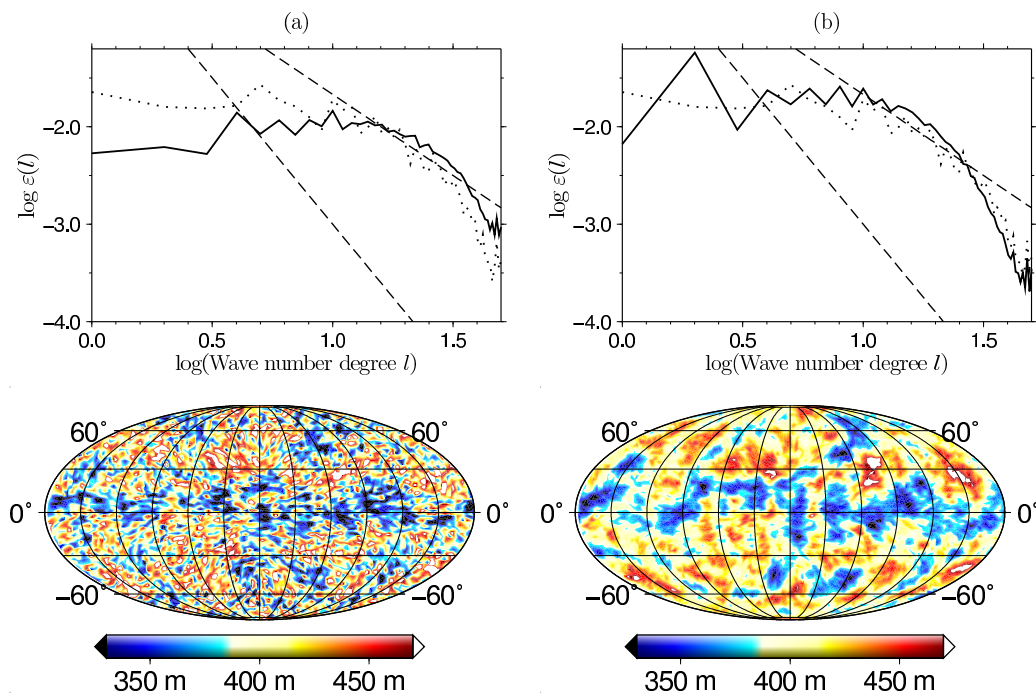


Abbildung 7.9: Spektrale Verteilung der kinetischen Energie ε (oben) und Höhenfeld h (unten) nach 20 Tagen für ICOSWP- (a) und Nambu- (b) Schema (ausgezogen). Anfangsbedingung: Weißes Rauschen (gepunktet). $k^{-\frac{5}{3}}$ - und k^{-3} -Linien (gestrichelt).

Eindruck vom Spektralverhalten zweidimensionaler Fluidynamik und entsprechender Simulationen geben.

Die spektrale Verteilung der kinetischen Energie und das zugehörige Höhenfeld nach 20 Tagen ist in Abb. 7.9 dargestellt. Der auffallendste Unterschied ist, dass das Spektrum des Nambu-Schemas steiler ist als dasjenige des ICOSWP-Schemas: Dieses zeigt mehr Energie in den großen und weniger in den kleinen Skalen, was auch in der Druckverteilung deutlich zu sehen ist. Damit wird klar, dass ein konservatives Schema den spektralen Energiefluss qualitativ anders behandelt. Es ergeben sich nicht nur am untersten Rand des Spektrums sondern auch auf globaler Ebene wesentliche Unterschiede im Vergleich zu einem nichtkonservativen Schema.

7.4.4 Die Erhaltung der Wirbel-Casimire

Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, ist im analytischen Fall jedes beliebige Moment der potentiellen Vorticity erhalten. Hier ist ein Schema entwickelt worden, welches die potentielle Enstrophie exakt erhält. Prinzipiell wäre mit dieser Methode auch die Erhaltung von höheren Momenten der Vorticity denkbar. Dieses Vorgehen hat sich aber als unpraktikabel erwiesen. Die gleichzeitige Erhaltung mehrerer Wirbel-Casimire ist allerdings nicht möglich. In Abb. 7.10 und 7.11 sind die Bilanzen der zweiten, vierten und sechsten po-

tentiellen Vorticitymomente aufgetragen. Die Verletzung der Erhaltung nimmt offenbar mit steigender Potenz zu. Keines der beiden Schemen erzielt für die höheren Momente eine annähernd gute Erhaltung wie für die Enstrophie. Die Güte hängt dabei auch von den Anfangsbedingungen ab: Während für eine typische Schwerewelle (Abb. 7.10) das Nambu-Schema deutlich bessere Resultate erbringt, ist dies für den barotrop instabilen Scherstrom (Abb. 7.11) nicht der Fall.

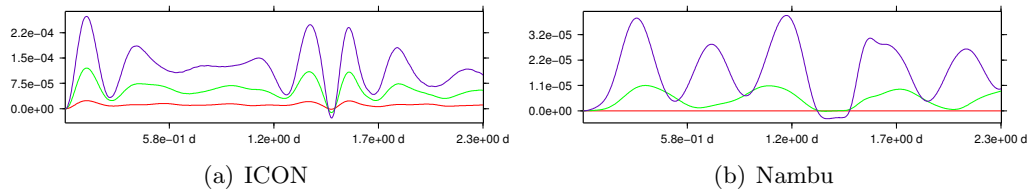


Abbildung 7.10: Bilanzen von Enstrophie (rot), viertem (grün) und sechstem (violett) Moment der potentiellen Vorticity. Anfangsbedingung: Schwerewelle.

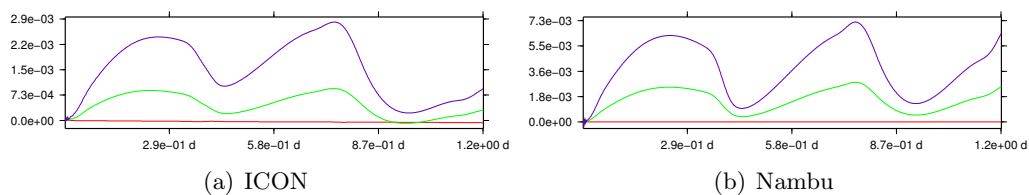


Abbildung 7.11: Bilanzen von Enstrophie (rot), viertem (grün) und sechstem (violett) Moment der potentiellen Vorticity. Anfangsbedingung: Galewsky et al. (2004).

Wie im Folgenden gezeigt wird, kann die Beziehung zwischen der Casimir-Erhaltung und der individuellen Erhaltung der potentiellen Vorticity durch die Iso-Flächen-Erhaltung der PV besonders einfach ausgedrückt werden. Die zweidimensional inkompressible Strömung lässt sich durch die barotrope Vorticitygleichung und die diagnostische Kontinuitätsgleichung darstellen:

$$\begin{aligned} \frac{d\zeta}{dt} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0. \end{aligned}$$

Sei nun ein Anfangszustand gegeben, bei dem die Vorticity nur endlich viele Werte $\zeta \in \Omega = \{\zeta_1, \dots, \zeta_N\}$ annimmt. Wegen der individuellen Vorticityerhaltung sind die Vorticity-Isoflächen mitbewegte Flächen und mit dem Reynoldsen Transporttheorem gilt

$$\frac{d}{dt} \int_{\zeta=\zeta_i} dA = \int_{\zeta=\zeta_i} dA \nabla \cdot \mathbf{v} = 0.$$

Das Integrationsgebiet ist dabei die ζ_i -Isofläche. Sei nun ein beliebiges Funktional

$$\mathcal{F} := \int dA F(\zeta)$$

der Vorticity gegeben, z. B. ein Vorticitymoment. Die Integration werde über das gesamte Gebiet ausgeführt. Aufgrund der Isoflächen-Erhaltung ergibt sich für die Tendenz dieses Funktionals

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int dA F(\zeta) &= \frac{d}{dt} \sum_i \int_{\zeta=\zeta_i} dA F(\zeta) \\ &= \sum_i F(\zeta_i) \frac{d}{dt} \int_{\zeta=\zeta_i} dA = 0. \end{aligned}$$

Aus der individuellen Vorticityerhaltung folgt also die Flächenerhaltung für die Vorticity-Isoflächen und daraus direkt die Erhaltung sämtlicher Casimire. Diese Methode wird in McLachlan (1999) zur Entwicklung einer Methode benutzt, die ähnlich dem Ansatz von Zeitlin (1991) sämtliche Casimire erhält.

Ein vergleichbarer Sachverhalt ergibt sich für die Flachwasserdynamik: Anstelle der zweidimensionalen Divergenzfreiheit ergibt sich dieses Modell aus der dreidimensionalen Divergenzfreiheit verbunden mit der Barotropie-Annahme. Die individuelle Erhaltungsgröße ist hier die potentielle Vorticity und die Kontinuitätsgleichung ist eine prognostische Gleichung für die Schichtdicke:

$$\frac{dq}{dt} = 0 \tag{7.35}$$

$$\frac{dh}{dt} + h \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \tag{7.36}$$

Unter der Annahme, dass die potentielle Vorticity endlich viele Werte $q_i = \{q_1, \dots, q_N\}$ annimmt, ergibt sich daraus ähnlich wie vorher die Erhaltung der höhengewichteten Fläche, also des Volumens der Isoflächen der potentiellen Vorticity:

$$\frac{d}{dt} \int_{q=q_i} dA h = \int_{q=q_i} dA \left(\frac{dh}{dt} + h \nabla \cdot \mathbf{v} \right) = 0.$$

Für ein beliebiges Funktional

$$\mathcal{G} = \int dA h G(q)$$

der höhengewichteten potentiellen Vorticity ergibt sich wieder globale Erhaltung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int dA h G(q) &= \frac{d}{dt} \sum_i \int_{q=q_i} dA h G(q) \\ &= \sum_i G(q_i) \frac{d}{dt} \int_{q=q_i} dA h = 0. \end{aligned}$$

Genau wie sich im Fall der zweidimensional inkompressiblen Strömung aus der individuellen Vorticity-Erhaltung die Erhaltung der Vorticity-Iso-Flächen und beliebiger Funktionale der Vorticity ergeben hat, ergibt sich im dreidimensional inkompressiblen Flachwassermodell aus der individuellen PV-Erhaltung die Erhaltung der höhengewichteten PV-Iso-Flächen und höhengewichteter Funktionale der PV. Dies ist in Tab. 7.2 zusammengefasst.

	2D-inkompressibel: Barotrope Vorticitygleichung	3D-inkompressibel: Flachwassermodell
	$\frac{d\zeta}{dt} = 0$ $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$	$\frac{dq}{dt} = 0$ $\frac{dh}{dt} + h\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$
Flächenerhaltung	$\frac{d}{dt} \int_{\zeta=\zeta_i} dA = 0$	$\frac{d}{dt} \int_{q=q_i} dA h = 0$
Casimir-Erhaltung	$\frac{d}{dt} \int dA F(\zeta) = 0$	$\frac{d}{dt} \int dA hG(q) = 0$

Tabelle 7.2: Casimir-Erhaltung und individuelle PV-Erhaltung

Für das hier verwendete Nambu-Schema auf dem ICON-Gitter wurde gezeigt, dass explizit nur ein Casimir erhalten ist (Abb. 7.10 und 7.11). Daraus folgt mit der vorherigen Diskussion, dass nicht von strikter individueller PV-Erhaltung gesprochen werden kann, da dann sämtliche Casimire erhalten wären. In der Praxis zeigt sich aber der dominante Einfluss der (potentiellen) Enstrophie, für die die Erhaltung nachgewiesen wurde. Sie hängt nicht nur direkt mit dem Energiefluss durch die Skalen zusammen (Kolmogorov, 1941), sondern nimmt auch in der statistischen Beschreibung eine zentrale Rolle ein (Salmon, 1998; Abramov und Majda, 2003; Dubinkina und Frank, 2009). Methoden wie HPM, die auf einer teilchenbasierten Beschreibung der Fluide beruhen, geben entsprechende Eigenschaften in hohem Maß wieder. Ein Vergleich von Resultaten des Nambu-Schemas mit solchen von HPM findet sich in Shin et al. (2009).

Für die dreidimensionale Helmholtzgleichung

$$\frac{d\xi}{dt} = \xi \cdot \nabla \mathbf{v}$$

gilt ein gänzlich anderes Bild: Der Twisting-Term verhindert die Existenz eines individuell erhaltenen Wirbelvektors und entsprechend ergibt sich nur ein einziger Wirbel-Casimir, die Helizität. Eine Nambu-Darstellung dieser Dynamik wird in Néviri (1998); Néviri und Sommer (2009) vorgeschlagen und die prinzipiellen Unterschiede zwischen zwei- und dreidimensionaler Fluidodynamik werden in Arnold und Khesin (1998) ausführlich diskutiert.

Kapitel 8

Nambu-Formen in der Hydro-Thermodynamik

In Kapitel 4 wurde eine Übersicht über bereits existierende Nambu-Darstellungen von diskreten sowie kontinuierlichen atmosphärendynamischen Modellen gegeben. Diese umfassen sowohl inkompressible als auch kompressible Modelle mit und ohne thermodynamische Freiheitsgrade. Hier werden weitere Beispiele für solche Darstellungen gegeben. Sie schließen sich den vorgenannten insofern an, als dass auch sie stets eine Energieform sowie eine globale Wirbelgröße als konstituierende Größen verwenden und damit das Konzept der Energie-Wirbel-Theorie weiter untermauern.

8.1 Das quasigeostrophische Zweischicht-Modell

Aus dem 2-Schicht-Flachwassermodell (Abschnitt 2.3) geht unter den Annahmen

- quasigeostrophische Bewegung (d. h. kleine Rossbyzahl $Ro \ll 1$),
- kleine Variation des Coriolisparameters (d. h. $\frac{\beta L}{f_0} \ll 1$) sowie
- feste Gesamthöhe (d. h. keine externen Schwerewellen)

das quasigeostrophische 2-Schicht-Modell mit fester Gesamthöhe (engl. rigid-lid) hervor (Salmon, 1988). Die beiden Schichten seien dabei wieder inkompressibel mit den Dichten ρ_1 und ρ_2 . Die Dynamik wird durch die individuelle Erhaltung der potentiellen Vorticity q_1 bzw. q_2 vollständig beschrieben:

$$\begin{aligned}\partial_t q_i + J(\Psi_i, q_i) &= 0 \\ q_1 &= \Delta \Psi_1 + f + \frac{f_0^2}{g'H_1}(\Psi_2 - \Psi_1) \\ q_2 &= \Delta \Psi_2 + f + \frac{f_0^2}{g'H_2}(\Psi_1 - \Psi_2).\end{aligned}$$

Die Variablen sind hier wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
q_1 &= \zeta_1 - \frac{f_0}{g'H_1}(\Psi_1 - \Psi_2) && \text{Potentielle Vorticity in Schicht 1 (untere Schicht)} \\
q_2 &= \zeta_2 - \frac{f_0}{g'H_2}(\Psi_2 - \Psi_1) && \text{Potentielle Vorticity in Schicht 2 (obere Schicht)} \\
\Psi_i &&& \text{Stromfunktion in Schicht } i \\
f &&& \text{Coriolisparameter} \\
f_0 &&& \text{Coriolisparameter in zentraler Breite} \\
H_i &&& \text{Die mittlere Dicke der Schicht } i \\
g' &= \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1} g && \text{reduzierte Gravitationskonstante} \\
h_1 &= H_1 + \frac{\rho_1}{g'}(\Psi_1 - \Psi_2) && \text{Dicke der Schicht 1 (untere Schicht)} \\
h_2 &= H_2 + \frac{\rho_2}{g'}(\Psi_2 - \Psi_1) && \text{Dicke der Schicht 2 (obere Schicht)}
\end{aligned}$$

Im Gegensatz zum Flachwassermodell wird die Strömung also ausschließlich durch den rotationellen Freiheitsgrad, die quasigeostrophische PV beschrieben. Die Gesamtenergie des Systems kann durch die Stromfunktionen ausgedrückt werden.

$$\mathcal{H} = \frac{\rho_1}{2} \int dA \left(H_1 (\nabla \Psi_1)^2 + H_2 (\nabla \Psi_2)^2 + \frac{f_0^2}{g'} (\Psi_1 - \Psi_2)^2 \right).$$

Die quasigeostrophische potentielle Enstrophie ist als zweites Moment der PV definiert: $\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int dA (q_1^2 + q_2^2)$. Daraus ergeben sich die Funktionalableitungen

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q_1} &= -\rho_1 H_1 \Psi_1, & \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta q_1} &= q_1 \\
\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q_2} &= -\rho_2 H_2 \Psi_2, & \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta q_2} &= q_2.
\end{aligned}$$

Diese können zur Nambu-Darstellung des quasigeostrophischen Zweischicht-Modells verwendet werden:

$$\partial_t \mathcal{F} = \{ \mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E} \} = \int dA \left(\frac{1}{\rho_1 H_1} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta q_1} J \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q_1}, \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta q_1} \right) + \frac{1}{\rho_2 H_2} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta q_2} J \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q_2}, \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta q_2} \right) \right).$$

Im Vergleich mit dem entsprechenden Einschicht-Modell (Névir, 1998) konnte hier die Wechselwirkung zwischen den Schichten durch eine Modifikation des Energie-Funktional vorgenommen werden.

8.2 Das n -Schicht-Flachwassermodell

In diesem Abschnitt soll, als Vorbereitung der Nambu-Darstellung des kontinuierlich geschichteten Modells, diejenige des n -Schicht-Flachwassermodells (2.3) hergeleitet werden. Durch Summation der potentiellen und kinetischen Energie ergab sich dort für die Gesamtenergie

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_j \rho_j \int dA \left(h_j \mathbf{v}_j^2 + g(h_j^2 + 2h_j \tilde{h}_{j-1}) \right).$$

Daraus berechnen sich die Funktionalableitungen

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \tilde{\mathcal{H}}}{\delta \mathbf{v}_i} &= \rho_i h_i \mathbf{v}_i \\
\frac{\delta \tilde{\mathcal{H}}}{\delta h_i} &= \frac{1}{2} \rho_i \mathbf{v}_i^2 + \rho_i g h_i + \rho_i g \tilde{h}_{i-1} + \sum_{j=i+1}^n \rho_j g h_j \\
&= \rho_i \left(\frac{1}{2} \mathbf{v}_i^2 + g \left(\tilde{h}_i + \sum_{j=i+1}^n h_j \frac{\rho_j}{\rho_i} \right) \right) \\
&= \rho_i \Psi_i.
\end{aligned}$$

Die Poisson-Struktur ist damit genau dieselbe wie im Einschichtfall (Salmon, 2005) und unter der Verwendung der physikalischen Gesamtenergie des Systems können die Evolutionsgleichungen ohne weitere Näherungen als Poisson-Klammer geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
\partial_t \mathcal{F} &= \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} \\
&= \sum_{j=1}^n \frac{1}{\rho_j} \int dA \left(q_j \mathbf{k} \cdot \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}_j} \times \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}_j} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}_j} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h_j} + \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}_j} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta h_j} \right). \quad (8.1)
\end{aligned}$$

Die Dichte geht hier im Vergleich zum Einschichtmodell als zusätzlicher Parameter ein. Einsetzen der Kettenregel für die Funktionalableitung unter der Transformation zu Vorticity-Divergenz-Variablen in die nichtkanonische Poissonklammer (8.1) ergibt die entsprechende Poisson-Klammer:

$$\begin{aligned}
\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} &= \sum_{i \in X_n} \frac{1}{\rho_i} \int dA \underbrace{q_i \mathbf{k} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_i} \times \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_i}}_{\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\mu_i \mu_i}} \\
&+ \sum_{i \in X_n} \frac{1}{\rho_i} \int dA \underbrace{q_i \mathbf{k} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta_i} \times \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta_i}}_{\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\zeta_i \zeta_i}} \\
&+ \sum_{i \in X_n} \frac{1}{\rho_i} \int dA \underbrace{\left(q_i \left(\nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_i} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta_i} - \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_i} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta_i} \right) + \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_i} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h_i} - \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_i} \cdot \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta h_i} \right)}_{\{\mathcal{F}, \mathcal{H}\}_{\zeta_i \mu_i h_i}}.
\end{aligned}$$

Wie im Einschichtfall berechnen sich die Funktionalableitungen der Energie aus den Potentialen:

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta_i} = -\rho_i \chi_i, \quad \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_i} = -\rho_i \gamma_i, \quad \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h_i} = \rho_i \Psi_i.$$

Stromfunktion χ_i und Geschwindigkeitspotential γ_i des Impulses in Schicht i sind schichtweise definiert:

$$h_i \mathbf{v}_i = \mathbf{k} \times \nabla \chi_i + \nabla \gamma_i.$$

Die Funktionalableitungen der Enstrophie ergeben direkt

$$\frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \zeta_i} = \rho_i q_i, \quad \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \mu_i} = 0, \quad \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta h_i} = -\frac{1}{2} \rho_i q_i^2.$$

Damit können die einzelnen Terme der Poissonklammer als Nambu-Klammern geschrieben werden und es ergibt sich eine Nambu-Darstellung mit den schichtspezifischen prognostischen Größen Vorticity, Divergenz und Höhe:

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{F}[\zeta_1, \dots, \zeta_n, \mu_1, \dots, \mu_n, h_1, \dots, h_n] &= \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\} \\ &= \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta\zeta\zeta} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\mu\mu\zeta} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta\mu h}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Die Klammern sind dabei folgendermaßen gegeben:

$$\begin{aligned} \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta\zeta\zeta} &= \sum_j \frac{1}{\rho_j^2} \int dA J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta_j}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta_j} \right) \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \zeta_j} \\ \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\mu\mu\zeta} &= \sum_j \frac{1}{\rho_j^2} \int dA J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_j}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_j} \right) \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \zeta_j} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p) \\ \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta\mu h} &= \sum_j \frac{1}{\rho_j^2} \int dA \frac{1}{\partial_x q_j} \left(\partial_x \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta_j} \partial_x \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_j} - \partial_x \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_j} \partial_x \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta_j} \right) \partial_x \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta h_j} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p) \\ &\quad + \sum_j \frac{1}{\rho_j^2} \int dA \frac{1}{\partial_y q_j} \left(\partial_y \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta_j} \partial_y \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu_j} - \partial_y \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_j} \partial_y \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta_j} \right) \partial_y \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta h_j} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p). \end{aligned} \quad (8.3)$$

Wie bereits im Einschicht-Fall, wird die zweifache Antisymmetrie der letzten beiden Klammern durch die Summe über zyklische Permutationen sichergestellt. Die schichtabhängige Dichte tritt hier als Parameter auf. Der erste Term (8.3) ist strukturell identisch mit der Nambu-Klammer der barotropen Vorticitygleichung. Diese Darstellung benötigt im Gegensatz zu derjenigen des quasigeostrophischen Zweischicht-Modells keine Rigid-Lid-Randbedingung. Eine Implementierung dieser Form auf dem ICON-Gitter wird in Griewank (2009) dokumentiert und weist die erwarteten Eigenschaften auf.

8.3 Das hydrostatische Modell

In Salmon (2005, 2007) wird erwähnt, dass sich aus einer Nambu-Darstellung der Flachwassergleichungen auch eine solche für das hydrostatische System ergibt. Hier soll gezeigt werden, wie der Ausdruck für die potentielle Energie, deren Funktionalableitung sowie die vertikale Wechselwirkung aus dem Mehrschicht-Flachwassermodell folgt und sich damit eine konkrete Nambu-Formulierung für das hydrostatische Modell ergibt.

Der diskrete Schicht-Index i der Mehrschicht-Modelle wird im hydrostatischen System durch die kontinuierliche Variable z ersetzt. Außerdem wird die Dichte nicht mehr konstant gesetzt sowie der Twisting-Term (entsprechend der dreidimensionalen Wirbelgleichung) berücksichtigt. Da im Twisting-Term die Vertikalgeschwindigkeit eingeht,

diese aber gleichzeitig keine prognostische Größe ist, weist das hydrostatische Modell Elemente sowohl zwei- als auch dreidimensionaler Dynamik auf. Diese unterscheiden sich jedoch bezüglich ihrer Nambu-Darstellung in charakteristischen Punkten (Abschnitt 9.1). Aus diesem Grund stellt der Twisting-Term bei der Definition einer Nambu-Darstellung für das hydrostatische Modell eine Schwierigkeit dar, welche durch die Wahl von isentropen Θ -Koordinaten umgangen werden kann. Die Dynamik wird damit effektiv zweidimensional und ist durch die prognostischen Gleichungen für die Horizontalgeschwindigkeit auf Θ -Flächen und die Pseudodichte gegeben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\Theta} \mathbf{v} + f \mathbf{k} \times \mathbf{v} &= -\nabla_{\Theta} M \\ \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \nabla_{\Theta} \cdot (\hat{\rho} \mathbf{v}) &= 0. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Die Pseudodichte $\hat{\rho}$ und die potentielle Temperatur Θ sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \rho \eta, & \eta &= \frac{\partial z}{\partial \Theta} \\ \Theta &= T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}}. \end{aligned}$$

Das Montgomery-Potential M in (8.4) kann in folgender Form geschrieben werden:

$$M(\Theta) = c_p T(\Theta) + g z(\Theta) = g \left(z(\Theta) + \frac{c_p}{R} \int_{\Theta}^{\Theta_{\text{top}}} d\Theta' \eta(\Theta') \frac{\rho(\Theta')}{\rho(\Theta)} \right). \quad (8.5)$$

Dies zeigt die Analogie mit dem Druckgradientterm in der Bewegungsgleichung des Flachwassersystems (2.21):

$$\frac{1}{\rho_i} p_i = g \left(\tilde{h}_i + \sum_{j=i+1}^n h_j \frac{\rho_j}{\rho_i} \right). \quad (8.6)$$

Der Unterschied ist, dass im Mehrschicht-Flachwassersystem die Dichten ρ_i feste Parameter sind, während sie im hydrostatischen Fall (zusammen mit $z(\Theta)$) aus der hydrostatischen Grundgleichung $\partial_{\Theta} p = -g \hat{\rho}$ und der idealen Gasgleichung ermittelt werden. Damit verfügt dieses Modell im Gegensatz zu den anderen, hier betrachteten auch über einen thermodynamischen Freiheitsgrad.

Das Gesamtsystem kann nur dann in isentropen Koordinaten geschrieben werden, wenn weder die oberste noch die unterste Schicht unterbrochen sind. Während die obere Randbedingung einer freien isentropen Fläche nicht sehr unrealistisch ist, gilt dies für die untere Randbedingung nicht, da üblicherweise die Orographie die isentropen Flächen schneidet. Praktische Methoden zur Umgehung dieses Problems finden sich in Hsu und Arakawa (1990). Mit der Weber-Transformation und der Bernoulli-Funktion

$$B = \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + c_p T + g z \quad (8.7)$$

kann die Bewegungsgleichung (8.4) in der Form

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\zeta_a \mathbf{k} \times \mathbf{v} - \nabla_{\Theta} B.$$

geschrieben werden. Die Gesamtenergie des hydrostatischen Modells setzt sich aus kinetischer, potentieller sowie innerer Energie zusammen. Letztere kommt dabei aus der Temperaturabhängigkeit der Dichten, im Gegensatz zu den konstanten Dichteparametern des Flachwassersmodells. Obwohl die dynamische Struktur dieselbe ist, fehlte dort der thermodynamische Aspekt. Um die Funktionalableitungen der kinetischen Energie nach den abgeleiteten Größen zu bestimmen, können wie im Flachwassersystem Stromfunktion und Geschwindigkeitspotential definiert werden:

$$\widehat{\rho} \mathbf{v} = \mathbf{k} \times \nabla_{\Theta} \chi + \nabla_{\Theta} \gamma.$$

Daraus ergeben sich die Funktionalableitungen

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{kin}} &= \int dV \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{kin}}}{\delta \zeta} &= -\chi, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{kin}}}{\delta \mu} &= -\gamma, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{kin}}}{\delta \widehat{\rho}} &= \frac{1}{2} \mathbf{v}^2, \\ \mathcal{H}_{\text{pot}} &= \int dV \rho g z, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{pot}}}{\delta \zeta} &= 0, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{pot}}}{\delta \mu} &= 0, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{pot}}}{\delta \widehat{\rho}} &= g z, \\ \mathcal{H}_{\text{int}} &= \int dV \rho c_v T, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{int}}}{\delta \zeta} &= 0, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{int}}}{\delta \mu} &= 0, & \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{int}}}{\delta \widehat{\rho}} &= c_p T, \\ \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{pot}} + \mathcal{H}_{\text{int}} \Rightarrow & \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} &= -\chi, & \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} &= -\gamma, & \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \widehat{\rho}} &= B. \end{aligned}$$

Die Ertelsche potentielle Vorticity kann auf Θ -Flächen als

$$\Pi := \frac{\boldsymbol{\xi}_a \cdot \nabla \Theta}{\rho} = \frac{\zeta_a \partial_z \Theta}{\rho} = \frac{\zeta_a}{\widehat{\rho}}$$

geschrieben werden und für die potentielle Enstrophie $\mathcal{E}_p = \frac{1}{2} \int dV \rho \Pi^2$ ergeben sich die Funktionalableitungen

$$\frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \zeta} = \Pi, \quad \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \mu} = 0, \quad \frac{\delta \mathcal{E}_p}{\delta \widehat{\rho}} = -\frac{1}{2} \Pi^2.$$

Sowohl die Bewegungsgleichungen als auch die Funktionalableitungen sind von derselben Struktur wie diejenige der Flachwassergleichungen. Damit kann eine Nambu-Darstellung des hydrostatischen Systems mit den prognostischen Größen Vorticity, Divergenz und Pseudodichte auf isentropen Flächen definiert werden:

$$\partial_t \mathcal{F}[\zeta, \mu, \widehat{\rho}] = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta \zeta \zeta} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\mu \mu \zeta} + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta \mu \widehat{\rho}}. \quad (8.8)$$

Die Klammern sind folgendermaßen gegeben:

$$\begin{aligned} \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta\zeta\zeta} &= \int dV J \left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\zeta}, \frac{\mathcal{H}}{\delta\zeta} \right) \frac{\delta\mathcal{E}_p}{\delta\zeta} \\ \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\mu\mu\zeta} &= \int dV J \left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mu}, \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} \right) \frac{\delta\mathcal{E}_p}{\delta\zeta} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p) \\ \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p\}_{\zeta\mu\hat{\rho}} &= \int dV \frac{1}{\partial_x \Pi} \left(\partial_x \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\zeta} \partial_x \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} - \partial_x \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mu} \partial_x \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} \right) \partial_x \frac{\delta\mathcal{E}_p}{\delta\hat{\rho}} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p) \\ &\quad + \int dV \frac{1}{\partial_y \Pi} \left(\partial_y \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\zeta} \partial_y \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mu} - \partial_y \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mu} \partial_y \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\zeta} \right) \partial_y \frac{\delta\mathcal{E}_p}{\delta\hat{\rho}} + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_p) \end{aligned}$$

Dies zeigt, dass die in Salmon (1998) beschriebene Analogie zwischen dem Flachwasser- und dem hydrostatischen Modell auch in der Nambu-Darstellung ihre Entsprechung findet. Im Gegensatz zur barotropen Vorticitygleichung wird das hydrostatische System, genau wie das Flachwassersystem, durch eine Summe aus Nambu-Klammern beschrieben, wobei die zusätzlichen Klammern den divergenten Anteil des Flusses darstellen.

8.4 Die resonante Wellentriade

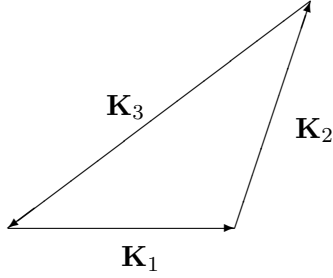


Abbildung 8.1: Resonante Wellentriade

Während eine einzelne Rossby-Welle eine analytische Lösung der quasigeostrophischen Vorticitygleichung ist, gilt dies wegen der Nichtlinearität der Gleichung für eine Überlagerung von Wellen nicht. Unter bestimmten Annahmen (Pedlosky, 1979) lassen sich jedoch Wellenvektoren \mathbf{K}_i identifizieren, welche resonant wechselwirken ohne dabei weitere Wellen anzuregen. Die Amplituden a_i dieser Wellen werden dann durch folgendes Gleichungssystem beschrieben (Pedlosky, 1979):

$$\frac{da_1}{dt} + \frac{2B(\mathbf{K}_2, \mathbf{K}_3)}{\mathbf{K}_1^2 + F} a_2 a_3 = 0 \quad (8.9)$$

$$\frac{da_2}{dt} + \frac{2B(\mathbf{K}_3, \mathbf{K}_1)}{\mathbf{K}_2^2 + F} a_3 a_1 = 0 \quad (8.10)$$

$$\frac{da_3}{dt} + \frac{2B(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2)}{\mathbf{K}_3^2 + F} a_1 a_2 = 0. \quad (8.11)$$

Hier ist \mathbf{K}_i der Wellenvektor der i -ten Welle und $F = (\frac{L}{R})^2$ das Quadrat des Verhältnisses von Längenskala zum Rossby-Deformationsradius ist. Außerdem wird die symmetrische Funktion

$$B(\mathbf{K}_i, \mathbf{K}_j) = \frac{1}{4}(\mathbf{K}_i^2 - \mathbf{K}_j^2)\mathbf{Z} \cdot (\mathbf{K}_i \times \mathbf{K}_j)$$

verwendet. \mathbf{Z} ist hier ein vertikaler Einheitsvektor im Spektralraum. Die Energie sowie die potentielle Enstrophie der resonanten Wellentriade können durch die Amplituden der Wellenvektoren ausgedrückt werden. Beide Größen sind auch in diesem stark reduzierten Modell erhalten:

$$\begin{aligned} \sum_j H_j &= \sum_j (\mathbf{K}_j^2 + F) \frac{a_j^2}{4} = \text{const} \\ \sum_j E_j &= \sum_j (\mathbf{K}_j^2 + F)^2 \frac{a_j^2}{2} = \text{const}. \end{aligned}$$

Aus der gleichzeitigen Erhaltung von Energie und Enstrophie in der Form eines Erhaltungssatzes für den Wellenvektor-Energieschwerpunkt

$$\frac{\sum_j \mathbf{K}_j^2 H_j(t)}{\sum_j H_j(t)} = \text{const}$$

folgt, dass ein Energiefluss zu größeren Wellenlängen zwingend an einen Energiefluss zu kleineren Wellenlängen gebunden ist. Die inverse Energiekaskade stellt sich hier besonders einfach dar. Aufgrund der Ähnlichkeit mit den Kreisgleichungen lassen sich die Amplitudengleichungen (8.9)–(8.11) in folgende Form bringen:

$$(\mathbf{K}_1^2 + F)(\mathbf{K}_2^2 + F)(\mathbf{K}_3^2 + F) \frac{d\mathbf{a}}{dt} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z} \cdot \mathbf{K}_2 \times \mathbf{K}_3 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{Z} \cdot \mathbf{K}_3 \times \mathbf{K}_1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{Z} \cdot \mathbf{K}_1 \times \mathbf{K}_2 \end{pmatrix} \nabla E \times \nabla H,$$

wobei $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)^T$ der Vektor der Wellenamplituden ist. Unter Verwendung der Resonanzbedingung $\sum_j \mathbf{K}_j = 0$ und der Definition $\kappa_i^2 := \mathbf{K}_i^2 + F$ lässt sich eine Nambu-Klammer für das System der Wellentriade definieren:

$$\frac{d}{dt} F(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{Z} \cdot \mathbf{K}_1 \times \mathbf{K}_2}{\kappa_1^2 \kappa_2^2 \kappa_3^2} \nabla F \cdot \nabla E \times \nabla H =: \{F, E, H\}.$$

Diese Klammer entspricht bis auf die Vorfaktoren genau der Nambu-Klammer der Eulerschen Kreisgleichung. Dieses Ergebnis zeigt, dass die Energie-Wirbel-Theorie auch in der spektralen Darstellung angewendet werden kann. Eine Antisymmetrie ergibt sich hier aus der Resonanzbedingung der Wellen und damit aus der notwendigen Bedingung für die Schließung des Systems. Genau wie in der Ortsraumdarstellung gehen also auch hier die Randbedingungen ein (vgl. Abschnitt 9.1). Nambu-Darstellungen für weitere spektrale Low-order-Modelle werden in Bihlo und Staufer (2010) diskutiert.

8.5 Das Lorenz'86-System

In Lorenz (1986) wird über eine spektrale Trunkierung der primitiven Gleichungen ein Neun-Moden-Modell hergeleitet. Aus einer weiteren Vereinfachung (Bokhove und Shepherd, 1995) ergibt sich ein Fünf-Komponenten-Modell (im Folgenden Lorenz'86-System genannt):

$$\begin{aligned}
 \frac{dx_1}{dt} &= -x_2x_3 + bx_2x_5 \\
 \frac{dx_2}{dt} &= -x_1x_3 + bx_1x_5 \\
 \frac{dx_3}{dt} &= -x_1x_2 \\
 \frac{dx_4}{dt} &= -\frac{1}{\varepsilon}x_5 \\
 \frac{dx_5}{dt} &= \frac{1}{\varepsilon}x_5 + bx_1x_2.
 \end{aligned} \tag{8.12}$$

Dieses System erhält eine diskrete Form der Energie und potentiellen Enstrophie:

$$H = \frac{1}{2} (x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2) \tag{8.13}$$

$$C = \frac{1}{2} (x_1^2 + x_2^2). \tag{8.14}$$

Mit der Energie H kann eine nichtkanonische Hamilton-Darstellung definiert werden (Bokhove und Shepherd, 1995):

$$\{F, G\} = \nabla F^T \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & -x_2 & 0 & x_2b \\ 0 & 0 & x_1 & 0 & -bx_1 \\ x_2 & -x_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} \\ -bx_2 & bx_1 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix}}_{=:B_P} \nabla G. \tag{8.15}$$

Die potentielle Enstrophie stellt in diesem trunkierten Modell einen Casimir dar:

$$\{F, C\} = \nabla F^T B_P \nabla C = 0 \quad \forall F.$$

Die Poisson-Matrix B_P kann in einen symplektischen (B_s) und einen Lie-Poisson-Teil (B_{LP}) aufgespalten werden:

$$B_P = \underbrace{\begin{pmatrix} 0_3 & & & & \\ & 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & & \\ & \frac{1}{\varepsilon} & 0 & & \\ & & & & \end{pmatrix}}_{=:B_s} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & -x_2 & 0 & x_2 b \\ 0 & 0 & x_1 & 0 & -bx_1 \\ x_2 & -x_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -bx_2 & bx_1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=:B_{LP}},$$

wobei alle leeren Einträge einer Null entsprechen. Der Teil B_{LP} ist linear in den x_i 's und in Lie-Poisson-Form. Die Strukturkonstanten Γ der zugehörigen Poisson-Klammer erfüllen definitionsgemäß

$$\{x_i, x_j\}_{LP} = B_{LP}^{ij} = \Gamma_{ij}^k x_k.^1$$

Insgesamt gibt es in diesem System $5^3 = 125$ Strukturkonstanten, wovon jedoch wegen der Antisymmetrieeigenschaft in den unteren Indizes nur 50 unabhängig sind. Davon wiederum sind bis auf folgende alle Null:

$$\begin{array}{ll} \Gamma_{23}^1 = 1 & \Gamma_{32}^1 = -1 \\ \Gamma_{13}^2 = -1 & \Gamma_{31}^2 = 1 \\ \Gamma_{25}^1 = -b & \Gamma_{52}^1 = b \\ \Gamma_{15}^2 = b & \Gamma_{51}^2 = -b. \end{array}$$

Diese Strukturkonstanten sind wegen

$$\begin{array}{ll} \Gamma_{12}^3 = 0 & \Gamma_{21}^3 = 0 \\ \Gamma_{12}^5 = 0 & \Gamma_{21}^5 = 0 \end{array}$$

nicht zweifach antisymmetrisch und es ergibt sich nicht direkt eine Nambu-Darstellung im Sinn von Abschnitt 9.2. Allerdings hängt der Casimir C nur von x_1 und x_2 ab. Damit

¹Um Verwechslungen mit den Exponenten zu vermeiden wurden hier die Indizes für die Basisfunktionen x_i, x_j unten gewählt.

kann ein zweifach antisymmetrischer Nambu-Tensor N definiert werden:

$$\begin{array}{ll}
N^{231} = 1 & N^{321} = -1 \\
N^{132} = -1 & N^{312} = 1 \\
N^{251} = -b & N^{521} = b \\
N^{152} = b & N^{512} = -b. \\
N^{123} = 1 & N^{213} = -1 \\
N^{125} = -b & N^{215} = b \\
N^{345} = r & N^{435} = -r \\
N^{534} = r & N^{354} = -r \\
N^{543} = -r & N^{453} = r.
\end{array}$$

Alle anderen Einträge des Tensors sind Null und der Parameter r ist eine beliebige Zahl. Es ergibt sich also eine 1-parametrische Schar von Nambu-Darstellungen:

$$\begin{aligned}
\nabla F^T B_{LP} \nabla G &= B_{LP}^{ij} F_{,i} G_{,j} = N^{ijk} F_{,i} G_{,j} C_{,k} \\
&= C_{,1}(F_{,2}G_{,3} - bF_{,2}G_{,5} - F_{,3}G_{,2} + bF_{,5}G_{,2}) \\
&\quad + C_{,2}(-F_{,1}G_{,3} + bF_{,1}G_{,5} + F_{,3}G_{,1} - bF_{,5}G_{,1}) \\
&\quad + C_{,3}(F_{,1}G_{,2} - F_{,2}G_{,1} + rF_{,4}G_{,5} - rF_{,5}G_{,4}) \\
&\quad + C_{,4}r(-F_{,3}G_{,5} + F_{,5}G_{,3}) \\
&\quad + C_{,5}(-bF_{,1}G_{,2} + bF_{,2}G_{,1} + rF_{,3}G_{,4} - rF_{,4}G_{,5}) \\
&=: \{F, G, C\}_N.
\end{aligned}$$

Das Gesamtsystem (8.12) schreibt sich damit als Summe aus einer Poisson- und einer Nambu-Klammer:

$$\{F, G\} = \{F, G\}_s + \{F, G, C\}_N.$$

Eine reine Nambu-Darstellung ist in den Variablen x_i aus Dimensionsgründen unzuweckmäßig: Die Hamilton- und Casimirfunktionen bestehen nur aus quadratischen Termen. Ein singularitätenfreier (d. h. ohne Brüche definierter) Nambu-Tensor führt also zu rein quadratischen (oder höherpotenten) Bewegungsgleichungen. Die Bewegungsgleichungen (8.12) enthalten jedoch auch lineare Terme. Der Poisson-Tensor (8.15) hat dagegen lineare und konstante Einträge, so dass sich dimensionsmäßig wieder die Bewegungsgleichungen ergeben:

$$\text{Bwgl} \sim z^2 + z = \underbrace{B_{LP}}_{\sim z+1} \underbrace{\frac{\partial H}{\partial z}}_{\sim z}.$$

Das ist eine notwendige Bedingung für die Existenz einer Hamilton-Darstellung in dieser Form. Ein Nambu- oder ein Poisson-Tensor mit ausschließlich konstanten Einträge erlaubt demnach nur quadratische *oder* lineare Bewegungsgleichungen. Erst die Kombination dieser beiden Möglichkeiten ergibt eine Darstellung des Gesamtsystems. Dieser

Sachverhalt ist zusammen mit demjenigen für das Lorenz'63-Modell in Tab. 8.1 zusammengefasst. Unter B_P, N, B_s finden sich die Dimensionen der entsprechenden Tensoren sowie die damit erzeugten Bewegungsgleichungen. Die passenden Möglichkeiten zur Wiedergabe des Gesamtsystems sind rot markiert. Eine Nambu-Darstellung des konservativen Anteil des Lorenz'63-Systems wurde in Névir und Blender (1993) diskutiert. Dabei entfällt die Notwendigkeit einer Kombination von Poisson- und Nambu-Systemen, da die Hamilton- und die Casimirfunktion dimensionsmäßig zu den Bewegungsgleichungen passen.

	Lorenz'63	Lorenz'86
Bewegungsgleichung	$\sim z^2 + z$	$\sim z^2 + z$
H	$\sim z^2 + z$	$\sim z^2$
C	$\sim z^2 + z$	$\sim z^2$
B_P /mögl. Bwgl.	$\sim z + 1 / \sim z^2 + z + 1$	$\sim z + 1 / \sim z^2 + z$
N /mögl. Bwgl.	$\sim 1 / \sim z^2 + z + 1$	$\sim 1 / \sim z^2$
B_s /mögl. Bwgl.		$\sim 1 / \sim z$
$B_s + N$ /mögl. Bwgl.		$/ \sim z^2 + z$

Tabelle 8.1: Dimensionsanalyse der Lorenz-Systeme

Kapitel 9

Geometrische und algebraische Eigenschaften der Nambu-Form

Wie gezeigt wurde, ermöglicht die Nambu-Darstellung interessante Anwendungen im Bereich der Numerik von partiellen Differentialgleichungen mit Erhaltungseigenschaften. Daneben ergeben sich im Zusammenhang mit der Nambu-Darstellung von fluid-dynamischen Systemen auch Fragen bezüglich ihrer geometrischen oder algebraischen Interpretation, was in diesem Kapitel diskutiert wird.

9.1 Lokale und globale Antisymmetrien

Bei einem Vergleich zwischen den Nambu-Darstellungen von zwei- und dreidimensionaler inkompressibler Fluidodynamik wie in Tab. 9.1 fällt auf, dass im zweidimensionalen Fall eine Antisymmetrie der Nambu-Klammer lokal aus der Antisymmetrie des Jacobi-Operators und die andere global aus der partiellen Integration (und damit letztlich über das Theorem von Stokes aus den Randbedingungen) folgt. In drei Dimensionen hingegen folgen beide Antisymmetrien lokal aus der Antisymmetrie des Spatproduktes. Des Weiteren ist es bemerkenswert, dass in zwei Dimensionen die einfachste Nambu-Darstellung stets abgeleitete Variablen (d. h. Wirbelvektor bzw. Vorticity und Divergenz) als prognostische Größen verwendet. In drei Dimensionen dagegen kommen sowohl abgeleitete als auch Geschwindigkeitsvariablen gleichermaßen vor. Zusammengefasst ergeben sich daraus die (miteinander verbundenen) Fragen:

- Wieso ist eine Antisymmetrie von Nambu-Darstellungen zweidimensionaler Fluid-dynamik stets über die Randbedingungen gegeben?
- Weshalb sind die Nambu-Darstellungen zweidimensionaler Fluidodynamik in abgeleiteten Variablen strukturell einfacher?
- Warum ergeben sich für die dreidimensionale Fluidodynamik konträre Antworten?

Ein Hinweis auf die Antwort zur ersten (und damit auch zur dritten) Frage ergibt sich aus der Beobachtung, dass im dreidimensionalen Ortsraum die Volumenform eine 3-Form

	Zweidimensionale Fluiddynamik	Dreidimensionale Fluiddynamik
Bewegungsgleichung	$\partial_t \zeta = -J(\psi, \zeta)$	$\partial_t \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi}$
Nambu-Klammer	$\{\mathcal{F}, \mathcal{E}, \mathcal{H}\}$ $= \int dA \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} J \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right)$	$\{\mathcal{F}, h, \mathcal{H}\}$ $= - \int dV \left(\nabla \times \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \boldsymbol{\xi}} \right)$ $\cdot \left(\nabla \times \frac{\delta h}{\delta \boldsymbol{\xi}} \right) \times \left(\nabla \times \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \boldsymbol{\xi}} \right)$
Antisymmetrien	1 lokal, 1 global	2 lokal

Tabelle 9.1: Antisymmetrien der zwei- und dreidimensionalen, inkompressiblen Fluid-
dynamik

ist. Diese ist, analog zum 3-Tensor der Nambu-Darstellung, zweifach antisymmetrisch. Entsprechend kann die kartesische 3-Form im dreidimensionalen Ortsraum zu einer zweifach antisymmetrischen Nambu-Klammer auf dem Phasenraum der Funktionen auf diesem Ortsraum integriert (oder im Diskreten summiert) werden. Im zweidimensionalen Ortsraum ist die Volumenform hingegen eine 2-Form, woraus sich nicht in derselben direkten Weise ein Nambu-3-Tensor ableiten lässt. Das bedeutet nicht, dass mit einer Volumenform auf dem Ortsraum stets eine Nambu- (oder Hamilton-) Darstellung eines fluiddynamischen Systems definiert wird. Tatsächlich muss dies im Einzelfall durch Einsetzen passender Erhaltungsgrößen untersucht werden. Es zeigt aber, dass die Eigenschaften des dreidimensionalen Raumes direkt die Antisymmetriebedingungen einer Nambu-Darstellung der entsprechenden Fluiddynamik liefern. Dies kann am Beispiel der dreidimensional inkompressiblen Dynamik nachvollzogen werden: Die Nambu-Darstellung des rotationsbehafteten Anteils der Advektion $\boldsymbol{\xi} \times \mathbf{v}$ in Geschwindigkeitsvariablen lautet:

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{G}, \mathcal{H}\} = \int dV \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}} \cdot \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \mathbf{v}} \times \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}}.$$

Diese Form wird z. B. in der Darstellung der nichthydrostatischen Dynamik verwendet. Für unversetzte (aber nicht notwendigerweise homogene) Gitter mit Kontrollvolumen

$\{V_i\}$ ergibt jede Diskretisierung dieser Klammer ein gekoppeltes Tripel-System:

$$\{F, G, H\} = \sum_i \frac{1}{V_i^2} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{v}_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial \mathbf{v}_i} \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{v}_i} = \sum_i \frac{1}{V_i^2} \frac{\partial(F, G, H)}{\partial(u_i, v_i, w_i)}.$$

Die lokale 3-Form $\frac{1}{V_i^2} du_i \wedge dv_i \wedge dw_i$ wird so zu einer Nambu-3-Form des Gesamtsystems summiert:

$$N = \sum_i \frac{1}{V_i^2} du_i \wedge dv_i \wedge dw_i.$$

Diese Form der Nambu-Klammer ist ohne Anwendung auf die Fluidodynamik bereits von Nambu (1973) vorgeschlagen worden. Das Vorgehen ist dabei analog zur Konstruktion einer symplektischen 2-Form für n -Teilchen aus der symplektischen 1-Teilchen-Form. Die Wechselwirkung wird jeweils durch die Hamiltonfunktion dargestellt, während die Gesamtform sich aus einzelnen, entkoppelten lokalen Formen zusammensetzt. Auf einem zweidimensionalen Ortsraum existiert diese natürliche Einteilung in Tripel dagegen nicht, da dort die entsprechende Volumenform eine 2-Form ist und lokale 3-Formen (d. h. aus du_i und dv_i aufgebaute) stets trivial sind. Deswegen muss die Antisymmetrie auf eine andere, üblicherweise kompliziertere Weise sichergestellt werden.

Eine Methode, die sich dafür stets anwenden lässt, ist die Antisymmetrisierung durch Addition von zyklischen Termen. Diese wird bei der Nambu-Diskretisierung ausgeführt um die Antisymmetrieeigenschaften des diskreten Nambu-Tensors zu gewährleisten. Manche Systeme benötigen die Antisymmetrisierung auch schon in ihrer Feld-Form, z. B. die Flachwassergleichungen oder die Darstellung der Vorticitygleichung durch höhere Vorticitymomente:

Beispiel (Barotrope Vorticitygleichung). *Die barotrope Vorticitygleichung besitzt unter anderem die Vorticity-Casimire*

$$\mathcal{E}_n := \frac{1}{n+2} \int dA \zeta^{n+2}.$$

Sie können als zweite konstituierende Erhaltungsgröße zur Nambu-Darstellung dieses Systems verwendet werden (Salmon, 2005):

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_n = \frac{1}{2n+3} \int dA \frac{1}{\zeta^n} \left(J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}_n}{\delta \zeta} + cyc(\mathcal{E}_n, \mathcal{F}, \mathcal{H}) \right).$$

Aus

$$\frac{\delta \mathcal{E}_n}{\delta \zeta} = \zeta^{n+1} = \zeta^n \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} = \left(\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right)^{n+1}$$

folgt, dass diese Darstellung tatsächlich wieder die barotrope Vorticitygleichung ergibt:

$$\begin{aligned}
\{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_n\}_n &= \frac{1}{2n+3} \int dA \frac{1}{\zeta^n} \left(J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}_n}{\delta \zeta} \right. \\
&\quad \left. + J \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta}, \left(\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right)^{n+1} \right) \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} + J \left(\left(\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right)^{n+1}, \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \\
&= \frac{1}{2n+3} \int dA \left(J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right. \\
&\quad \left. + (n+1) J \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} + (n+1) J \left(\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \\
&= \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\},
\end{aligned}$$

wobei die Antisymmetrie der Klammer $\{\cdot, \cdot, \cdot\}$ und damit die Randbedingungen eingegangen sind. Eine Antisymmetrie folgt unmittelbar aus den Eigenschaften des Jacobi-Operators, die andere aus den zyklischen Vertauschungen. Die Klammer ohne zyklische Vertauschung

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_n^* = \frac{1}{n+1} \int dA \frac{1}{\zeta^n} J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}_n}{\delta \zeta}$$

ist hingegen (außer für $n=0$, entspricht $\mathcal{E}_n = \mathcal{E}$) nicht antisymmetrisch:

$$\begin{aligned}
\{\mathcal{F}, \mathcal{E}_n, \mathcal{H}\}_n^* &= \frac{1}{n+1} \int dA \frac{1}{\zeta^n} J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{E}_n}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \\
&= \frac{1}{n+1} \int dA \frac{1}{\zeta^n} (n+1) \zeta^n J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \\
&= \{\mathcal{F}, \mathcal{E}, \mathcal{H}\} = -\{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\} \\
&= - \int dA J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} \\
&= - \int dA \frac{1}{\zeta^n} J \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \right) \frac{\delta \mathcal{E}_n}{\delta \zeta} \\
&= -(n+1) \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}_n\}_n^*.
\end{aligned}$$

In diesem Beispiel zeigt sich einerseits die besondere Rolle der Enstrophie als zweites Vorticitymoment, und andererseits, dass typischerweise bei der Nambu-Darstellung von zweidimensionaler Fluidodynamik die Randbedingungen eine wichtige Rolle spielen. Dies entspricht obiger Argumentation über die Rolle der Volumenform und gilt selbst dann, wenn eine Antisymmetrisierung angewendet wurde. Daraus ergeben sich weitere Konsequenzen: Wenn also in der zweidimensionalen Fluidodynamik die zweifache Antisymmetrie über die Randbedingungen und damit den Satz von Stokes hergeleitet wird, ist hierfür das Auftreten eines Differentialoperators notwendig. Wegen

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}} = -\nabla \times \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \boldsymbol{\xi}} - \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}$$

oder in 2D

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}_h} = -\nabla_h \times \mathbf{k} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} - \nabla_h \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu_h}$$

treten diese Differentialoperatoren nur bei Verwendung der abgeleiteten Variablen auf. Sollen dennoch Geschwindigkeitsvariablen verwendet werden, so müssen (aus Dimensionsgründen) Differentialoperatoren im Zähler durch solche im Nenner kompensiert werden. Genau dies passiert bei den Flachwassergleichungen: Während die Nambu-Darstellung in Vorticity-Divergenz-Variablen noch einigermaßen simpel ist, ist die Nambu-Darstellung in Geschwindigkeitsvariablen kompliziert, vor allem wegen der zusätzlichen PV-Gradienten im Nenner (Salmon, 2005):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}[\mathbf{v}, h]}{\partial t} &= \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\mathbf{v}} \\ \{\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\mathbf{v}} &= - \int dA \mathbf{k} \cdot \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{v}} \times \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}} \left(\frac{1}{2\partial_x q} \partial_x \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta h} + \frac{1}{2\partial_y q} \partial_y \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta h} \right) \\ &\quad - \int dA \left(\frac{1}{3q^2} J \left(\frac{q^{\frac{3}{2}}}{\partial_y q} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta u}, \frac{q^{\frac{3}{2}}}{\partial_y q} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u} \right) \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta h} \right) - \int dA \left(\frac{1}{3q^2} J \left(\frac{q^{\frac{3}{2}}}{\partial_x q} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta v}, \frac{q^{\frac{3}{2}}}{\partial_x q} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta v} \right) \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta h} \right) \\ &\quad + \text{cyc}(\mathcal{F}, \mathcal{H}, \mathcal{E}). \end{aligned}$$

Dies hat auch Konsequenzen für die praktische Anwendung: Die Kürzung dieser Singularitäten ist bereits in Vorticity-Divergenz-Variablen nur auf bestimmten Gittern möglich. Für die Darstellung in Geschwindigkeitskoordinaten ist noch überhaupt keine singularitätenfreie Diskretisierung bekannt. Dies beantwortet die zweite (und dritte) obige Frage. Da nur in abgeleiteten Variablen Differentialoperatoren vor den Funktionalableitungen auftreten, kann nur dann das Gauß- oder das Stokes-Theorem angewendet werden. Alternativ können Terme im Nenner eingeführt werden, mit den erwähnten negativen Nebenwirkungen. Entsprechend fällt die Nambu-Darstellung von zweidimensionaler Fluidodynamik in abgeleiteten Variablen typischerweise einfacher aus als in Geschwindigkeitsvariablen.

9.2 Die Lie-Algebra von Nambu-Systemen

In diesem Abschnitt soll für gewöhnliche Differentialgleichungen die Beziehung zwischen ihrer Nambu-Darstellung und der Lie-Algebra¹ ihrer Poisson-Klammer² diskutiert werden. Wie in Kapitel 3 dargestellt, ist die Nambu-Darstellung eine Alternative zur nichtkanonischen Hamilton-Darstellung von singulären Systemen. Eine spezielle Klasse von singulären Systemen sind die Lie-Poisson-Systeme. Diese zeichnen sich durch einen linearen Poisson-Operator aus. Dadurch bilden die linearen Funktionen auf dem Phasenraum eine endlichdimensionale Unter-Algebra, die besonders einfach untersucht werden kann. Da insbesondere die Bewegungsgleichungen der Fluidodynamik in Eulerscher Darstellung

¹Anhang B.1

²Anhang A

aus einer Lie-Poisson-Reduktion hervorgehen (Marsden und Weinstein, 1974), lassen sich auch für die Meteorologie interessante Systeme auf diese Art untersuchen.

Gegeben sei ein endlichdimensionaler Phasenraum M mit Koordinaten (z_1, \dots, z_n) sowie eine Lie-Poisson-Klammer auf dem Raum der Funktionen auf M . Dieser wird damit zu einer unendlichdimensionalen Lie-Algebra und die linearen Funktionen bilden eine n -dimensionale Unter-Algebra. Darauf seien die Strukturkonstanten Γ gegeben:

$$\{z^i, z^j\} = \Gamma_k^{ij} z^k.$$

Daraus lässt sich die Killing-Form $K^{ij} = \Gamma_l^{ik} \Gamma_k^{jl}$ der Lie-Algebra der linearen Funktionen berechnen. Mit den Komponenten der Killing-Form kann ein Index der Strukturkonstanten ‚gehoben‘ werden und es resultiert ein zweifach antisymmetrischer, 3-fach kontravarianter Tensor:

$$\Gamma^{ijk} = \Gamma_{k'}^{ij} K^{k'k}.$$

Die zweite Antisymmetrie dieses Tensors folgt dabei aus der Jacobi-Identität. Sofern es sich um eine halbeinfache Lie-Algebra handelt, kann die Matrix der Killing-Form invertiert werden. $K_{ij} = (K^{ij})^{-1}$. Der Absolutbetrag des Ortsvektors (z_1, \dots, z_n) bezüglich der Killing-Form

$$C = \frac{1}{2} K_{ij} z^i z^j$$

ist dann eine Casimir-Funktion. Dies folgt mit $C_{,k} = K_{lk} z^l$ aus der Kontraktion eines antisymmetrischen mit einem symmetrischen Tensor:

$$\begin{aligned} \{F, C\} &= \{z^i, z^j\} F_{,i} C_{,j} \\ &= \Gamma_k^{ij} z^k F_{,i} C_{,j} \\ &= \Gamma^{ijk'} K_{k'k} F_{,i} C_{,j} z^k = \Gamma^{ijk'} F_{,i} C_{,j} C_{,k'} = 0 \quad \forall F. \end{aligned}$$

Mit C kann nun eine Nambu-Darstellung dieses Systems definiert werden (Bialynicki-Birula und Morrison, 1991):

$$\begin{aligned} \{F, H, C\} &= \Gamma^{ijk} F_{,i} H_{,j} C_{,k} \\ &= \Gamma^{ijk} F_{,i} H_{,j} K_{lk} z^l \\ &= \Gamma_l^{ij} z^l F_{,i} H_{,j} = \{F, H\}. \end{aligned}$$

Der dreifach kontravariante Tensor Γ^{ijk} nimmt hier die Rolle des Nambu-Tensors ein. Prinzipiell lässt sich so für beliebige halbeinfache Systeme in Lie-Poisson-Form eine Nambu-Darstellung definieren. Allerdings ergibt sich daraus, im Gegensatz zur von Salmon (2005) vorgeschlagenen Methode kein allgemeiner Algorithmus, um eine entsprechende Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung zu konstruieren, da die Jacobi-Identität der zugrundeliegenden Lie-Poisson-Form eine Voraussetzung für die obige Konstruktion ist. Weil die gängigen Diskretisierungen die Jacobi-Identität nicht notwendigerweise erfüllen, ist das Verfahren für numerische Anwendungen wenig interessant. Eine Ausnahme ist die Trunkierung der barotropen Vorticitygleichung von Zeitlin (1991), die

die algebraische Struktur der flächenerhaltenden Diffeomorphismen und damit sämtliche Casimire exakt umgesetzt. Im Folgenden wird an einem Beispiel gezeigt, dass verschiedene räumliche Differenzenschemen der barotropen Vorticitygleichung die Bedingung der Halbeinfachheit ebensowenig wie die Jacobi-Identität erfüllen.

Beispiel (Barotrope Vorticitygleichung). *Gegeben sei die singuläre Hamilton-Darstellung der barotropen Vorticitygleichung*

$$\{F, H\} = \int dA \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} J \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta}, \zeta \right).$$

Davon sei eine zentrale Diskretisierung zweiter Ordnung auf einem homogenen Gitter definiert:

$$\begin{aligned} \{F, H\} = \sum_{ij} \frac{\partial F}{\partial \zeta_{ij}} & \left(\left(\frac{\partial H}{\partial \zeta_{i+1,j}} - \frac{\partial H}{\partial \zeta_{i-1,j}} \right) (\zeta_{i,j+1} - \zeta_{i,j-1}) \right. \\ & \left. - \left(\frac{\partial H}{\partial \zeta_{i,j+1}} - \frac{\partial H}{\partial \zeta_{i,j-1}} \right) (\zeta_{i+1,j} - \zeta_{i-1,j}) \right). \end{aligned}$$

Der Poisson-Tensors dieses Systems ist zwar linear, erfüllt jedoch die Jacobi-Identität nicht. Die Strukturkonstanten ergeben sich unter Verwendung der Doppelindizes $(ij), (kl), (mn)$:

$$\begin{aligned} \Gamma_{(ij)(kl)}^{(mn)} &= \delta_{jl} \delta_{im} (\delta_{i,k-1} - \delta_{i,k+1}) (\delta_{n,j+1} - \delta_{n,j-1}) \\ &\quad - \delta_{ik} \delta_{jn} (\delta_{j,l-1} - \delta_{j,l+1}) (\delta_{m,i+1} - \delta_{m,i-1}). \end{aligned}$$

Für die Killing-Form findet man durch Multiplikation der Strukturkonstanten

$$K_{(ij)(i'j')} = -8\delta_{i,i'}\delta_{j,j'} + 2(\delta_{i,i'+1}\delta_{j,j'+1} + \delta_{i,i'+1}\delta_{j,j'-1} + \delta_{i,i'-1}\delta_{j,j'+1} + \delta_{i,i'-1}\delta_{j,j'-1}),$$

also eine Summe aus -8 Einheitsmatrix und vier Matrizen mit den Einträgen 2 auf einer Nebendiagonalen. Nach dem Satz von Gerschgorin (1931) liegen die Eigenwerte zwischen -16 und 0 (Abb. 9.1 (a)). Tatsächlich ist ein Eigenwert stets Null, die Killing-Form ist also singulär und diese Diskretisierung entspricht keiner halbeinfachen Lie-Algebra, selbst wenn die Jacobi-Identität erfüllt wäre. Ein ähnliches Bild ergibt sich für den Arakawa-Jacobian (Abb. 9.1 (b)). Dieselbe Rechnung für die dezentrale Diskretisierung erster Ordnung des Jacobi-Operators ergibt sogar eine völlig ausgeartete Killing-Form, bei der alle Eigenwerte Null sind.

Obwohl die Strukturkonstanten des Arakawa-Jacobian zweifach antisymmetrisch sind und der Casimir Enstrophie quadratisch ist, folgt diese konservative Form also nicht aus der Methode von Bialynicki-Birula und Morrison (1991).

Die Schwierigkeit besteht im Regelfall in der Erfüllung der Jacobi-Identität. Sofern diese erfüllt ist und das Lie-Poisson-System halbeinfach ist, existiert gemäß Bialynicki-Birula und Morrison (1991) stets eine Nambu-Darstellung mit quadratischem Casimir.

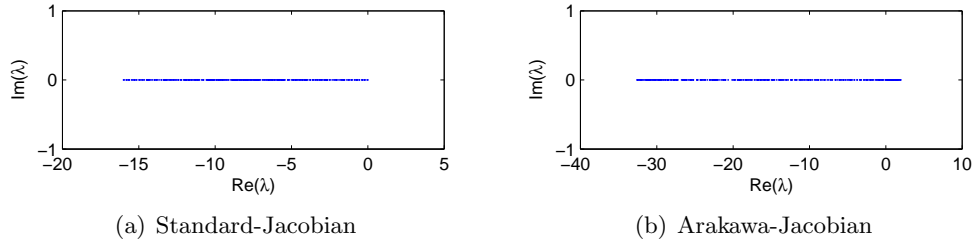


Abbildung 9.1: Eigenwerte der Killing-Form zweier Diskretisierungen der Vorticitygleichung

Diese Feststellung wird hier durch eine weitere Charakterisierung der in der so konstruierten Nambu-Darstellung verwendeten Casimire ergänzt: Als symmetrische Matrix ist durch eine passende Variablentransformation die Matrix der Killing-Form stets diagonalisierbar, dies entspricht einer ‚diagonalen‘ Form für den Casimir:

$$C = \sum_i \lambda_i (z^i)^2.$$

Die λ_i stehen hier für die Eigenwerte der Killing-Form. Die Bezeichnung ‚diagonal‘ bezieht sich dabei auf die Tatsache, dass in diesen Variablen keine gemischten Terme der Form $z^i z^j, i \neq j$ vorkommen. Dies ist beispielsweise beim Drehimpulsquadrat oder der Enstrophie der Fall, nicht jedoch bei der Helizität in Geschwindigkeits- oder abgeleiteten Variablen. In geeigneten Variablen ist auch die Helizität diagonal, da sie jedoch indefinit ist, treten stets Terme beider Vorzeichen auf. Dies gilt unabhängig von der Variablenwahl, da nach dem Trägheitssatz von Sylvester die Menge an positiven, negativen und Null-Eigenwerten charakteristisch für die Killing-Form und damit die Lie-Algebra ist. Im Folgenden wird der Fall diskutiert, in dem alle Eigenwerte dasselbe Vorzeichen haben. Diese können dann durch eine entsprechende Koordinatentransformation auf einen konstanten Wert skaliert werden, so dass die Killing-Form die Einheitsmatrix ist:

$$K_{ij} = \delta_{ij}.$$

Der Casimir nimmt damit eine speziell einfache Form an:

$$C = \sum_i (z^i)^2.$$

Die Nambu-Darstellung ergibt sich wie oben aus dem Nambu-Tensor $N^{ijk} = \Gamma_{ij_{k'}} \delta^{k'k}$:

$$\begin{aligned} \{F, H, C\} &= N_{ijk} F_{,i} H_{,j} C_{,k} \\ &= N_{ijk} F_{,i} H_{,j} \delta_{lk} z^l \\ &= \Gamma_l^{ij} z^l F_{,k} H_{,j} = \{F, H\}. \end{aligned}$$

Der einzige Unterschied zur oben erwähnten Form ist die besondere, definite Form des Casimirs. Die Strukturkonstanten sind dabei bereits in der 2-fach kontravarianten und einfach kovarianten Form Γ_k^{ij} zweifach antisymmetrisch, was unter anderem beim Eulerschen Kreisel der Fall ist:

Beispiel (Eulersche Kreiselgleichung). Für die Eulerschen Kreiselgleichungen

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{I_y - I_z}{I_y I_z} L_y L_z \\ \frac{I_z - I_x}{I_z I_x} L_z L_x \\ \frac{I_x - I_y}{I_x I_y} L_x L_y \end{pmatrix}$$

ist die Hamiltonsche Darstellung

$$\{F, H\} = \nabla F^T \begin{pmatrix} 0 & -\frac{L_z}{I_z} & \frac{L_y}{I_y} \\ \frac{L_z}{I_z} & 0 & -\frac{L_x}{I_x} \\ -\frac{L_y}{I_y} & \frac{L_x}{I_x} & 0 \end{pmatrix} \nabla G, \quad G = \frac{1}{2} (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)$$

bekannt. Sie hat die Hamilton-Funktion Gesamtdrehimpulsquadrat G und die Casimir-Funktion Energie $H = \frac{1}{2} (\frac{L_x^2}{I_x} + \frac{L_y^2}{I_y} + \frac{L_z^2}{I_z})$ und ist damit gewisserweise komplementär zur üblichen Hamilton-Darstellung (3.1) dieses Systems. Als Lie-Poisson-System lassen sich davon die Strukturkonstanten berechnen

$$\Gamma_{ij}^k = -\sigma(ijk) \frac{1}{I_k},$$

die offensichtlich nicht zweifach antisymmetrisch sind. Die Killing-Form hat die Komponenten

$$K_{ij} = \Gamma_{ik}^l \Gamma_{jl}^k = -\sigma(ikl) \sigma(jkl) \frac{1}{I_l} \frac{1}{I_k}$$

und ist diagonal mit negativen Diagonalelementen

$$K_{ii} = -\frac{2}{I_k I_l}, \quad i \neq k \neq l, l \neq i.$$

Also ist gemäß dem Cartan-Kriterium die zugehörige Lie-Algebra halbeinfach und es existiert dafür eine Nambu-Darstellung wie oben gezeigt. Da die Eigenwerte alle negativ sind, ist die Algebra sogar kompakt und der Casimir kann in eine besonders einfache Form gebracht werden. Tatsächlich sind in den Variablen

$$\tilde{L}_i := \frac{L_i}{\sqrt{I_i}}$$

die Strukturkonstanten auch in der gemischten Form zweifach antisymmetrisch. Die Killing-Form ist dann die Einheitsmatrix und das System nimmt folgende Nambu-Darstellung an:

$$\{F, H, G\} = \nabla F \cdot \nabla H \times \nabla G.$$

Der Casimir

$$H = \frac{1}{2} \left(\tilde{L}_x^2 + \tilde{L}_y^2 + \tilde{L}_z^2 \right)$$

ist dabei quadratisch und positiv definit.

Solche Lie-Algebren mit negativ-definiten Killing-Form werden auch kompakt genannt. Vereinfacht gesagt, ist eine Lie-Algebra kompakt, wenn der Parameterbereich der zugehörigen Gruppe kompakt ist. Beispiele für reelle Gruppen mit kompakten Lie-Algebren sind die Dreh- und die symplektische Gruppe und Beispiele für reelle Gruppen mit nichtkompakten Lie-Algebren sind die allgemeine lineare Gruppe oder die Lorentz-Gruppe. Entsprechende Aussagen gelten auch für Systeme, die nicht in Lie-Poisson-Form sind, die Halbeinfachheit ist dann allerdings schwieriger nachzuprüfen, da die linearen Funktionen keine Unter-Algebra mehr bilden. Bemerkenswerterweise erfüllen auch Nambu-Systeme die Jacobi-Identität nicht notwendigerweise. Die Arakawa-Form des Jacobi-Operators ist ein Beispiel hierfür. Auch die Nambu-Form von Systemen, die die Jacobi-Identität erfüllen, müssen nicht zwingenderweise aus den Strukturkonstanten hervorgehen, wie folgendes Beispiel zeigt:

Beispiel 2 (Lorenz'86-Modell (Abschnitt 8.12)). *Der Lie-Poisson-Teil des Lorenz'86-Modells lässt sich wie gezeigt in Nambu-Form darstellen. Mit den Strukturkonstanten kann auch die Jacobi-Identität nachgerechnet werden. Für die Killing-Form ergibt sich*

$$K = \begin{pmatrix} 0_3 & & & \\ & -1 & 0 & 2b \\ & 0 & 0 & 0 \\ & 2b & 0 & -b^2 \end{pmatrix}.$$

Neben dem Eigenwert Null treten ein positiver und ein negativer Eigenwert auf. Die zugehörige Lie-Algebra ist also weder kompakt noch halbeinfach.

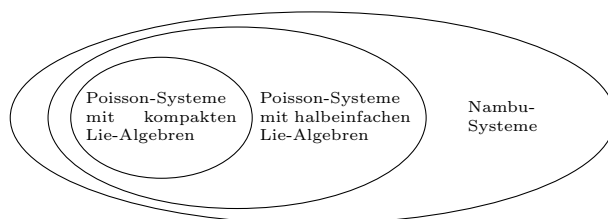
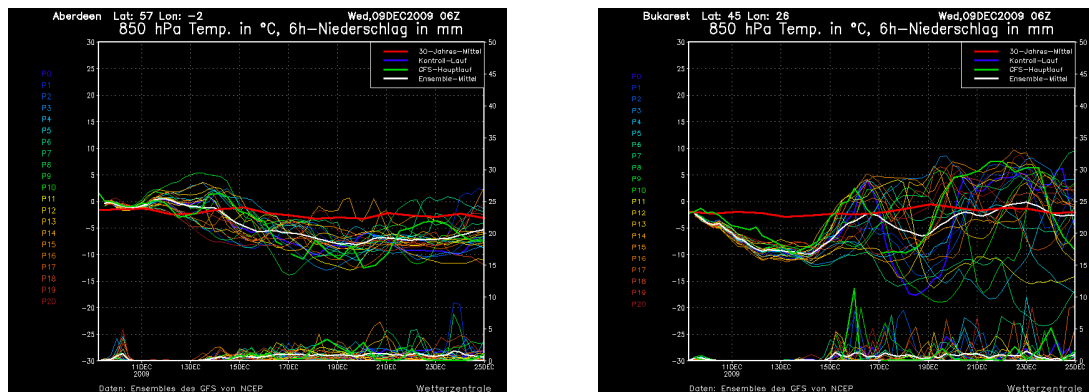


Abbildung 9.2: Die Lie-Algebra von Nambu-Systemen

Die Nambu-Darstellung in der hier verwendeten Form ist offensichtlich allgemeiner als in Bialynicki-Birula und Morrison (1991) dargestellt. Die Verhältnisse sind in Abb. 9.2 zusammengefasst. Eine Berücksichtigung der Takhtajan-Identität würde hier unter Umständen einen engeren Zusammenhang ergeben (vgl. Ausblick 10.2).

9.3 Das Phasenraumvolumen

In diesem Abschnitt sollen die phasenraumgeometrischen Eigenschaften von dynamischen Systemen allgemein und von solchen in Nambu-Darstellung im Speziellen untersucht werden. Die Hamilton- und damit auch die Nambu-Mechanik bieten einen praktischen Rahmen zur Diskussion der Phasenraumgeometrie, dasselbe gilt auch für Diskretisierungen, die auf diesen Darstellungen aufbauen. Das Verhalten eines Systems bezüglich seines Phasenraumvolumens steht auch in enger Beziehung zur statistischen Mechanik und zu Ensemble-Vorhersagen. Mit letzteren wird versucht, der nicht-vorhersagbaren Natur komplexer, nichtlinearer dynamischer Systeme besser gerecht zu werden. Ein numerisches Vorhersagemodell wird dabei einige Male mit leicht veränderten Anfangsbedingungen gestartet. Die Linien in Abb. 9.3 stellen hier beispielhaft die Resultate der einzelnen Ensemblemitglieder dar. Die Werte an zwei verschiedenen Orte entsprechen dabei den Werten entlang verschiedenen Dimensionen im Phasenraum. In diesem Beispiel bleiben die Ensemblemitglieder entlang der Dimension [Temperatur in Bukarest] offensichtlich wesentlich länger zusammen als entlang [Temperatur in Aberdeen]. Mit solchen Methoden lässt sich (durch Ensemblemittelung) also nicht nur ein besseres Vorhersageergebnis erzielen, sondern auch die Zuverlässigkeit der Prognose abschätzen.



(a) Temperatur in Aberdeen

(b) Temperatur in Bukarest

Abbildung 9.3: Ensembles-Vorhersage. (Quelle: <http://www.wetterzentrale.de>)

Die in dieser Diskussion zentralen Begriffe

- Reversibilität,
- Volumenerhaltung und
- Vorhersagbarkeit, bzw. Chaotisches Verhalten

stehen in enger jedoch nicht äquivalenter Beziehung. Für die ersten beiden Punkte wird das in Lamb (1996) gezeigt. Im Bezug auf chaotisches Verhalten lässt sich bereits am Lorenz'63-Modell erkennen, dass die naive Annahme, Volumenkontraktion führe zu Vorhersagbarkeit, falsch ist. Dieses Modell ist dissipativ, das Volumen eines Gebiets im

Phasenraum nimmt also unter dem Fluss ab. In der Tat geht dieses Volumen sogar sehr schnell gegen Null, der Attraktor hat offenbar eine niedrigere Dimension als der Phasenraum. Dies führt jedoch nicht dazu, dass naheliegende Zustände auch nahe beieinander bleiben. Das Gegenteil ist der Fall: Binnen kurzer Zeit wird eine anfangs kleine Punktwolke von Zuständen über einen weiten Bereich des Phasenraums verstreut, welcher im Wesentlichen durch die Erhaltungsgrößen gegeben ist. Trotz der massiven Volumenabnahme ist das System also nicht vorhersagbar.

9.3.1 Das Phasenraumvolumen von allgemeinen dynamischen Systemen

Während die Geometrie von Mannigfaltigkeiten und die Struktur darauf definierter Vektorfelder und Funktionen unabhängig von der Wahl der Koordinaten ist, werden Differentialgleichungen üblicherweise in bestimmten Variablen (den Phasenraumkoordinaten) geschrieben. Für ein bestimmtes dynamisches System existieren jedoch stets beliebige Koordinatendarstellungen. In diesem Abschnitt soll anhand verschiedener Beispiele gezeigt werden, inwiefern der Volumenbegriff von der Wahl dieser Variablen abhängt.

Beispiel (Lotka-Volterra-Modell (Lotka, 1925; Volterra, 1926)). *Die gängige Darstellung dieses Räuber-Beute-Modells verwendet die Variablen m (Anzahl Raubtiere) und n (Anzahl Beutetiere):*

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} m \\ n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m(\varepsilon - \gamma n) \\ -n(\varepsilon - \gamma m) \end{pmatrix} = \mathbf{X}.$$

Auf dem Phasenraum $\Gamma = \mathbb{R}^{2+}$ sind damit die Koordinaten m, n definiert und das erzeugende Vektorfeld \mathbf{X} ist in der entsprechenden Koordinatenbasis gegeben. Auf Γ können auch andere Koordinaten gewählt werden, z. B.

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\ln n \\ \ln m \end{pmatrix}.$$

Die Vektorfeldkomponenten transformieren entsprechend:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} m(\varepsilon - \gamma n) \\ -n(\varepsilon - \gamma m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon - \gamma e^p \\ \varepsilon - \gamma e^{-q} \end{pmatrix}.$$

Beide Darstellungen sind äquivalent in dem Sinn, dass sie durch eine Koordinatentransformation auf Γ auseinander hervorgehen. Typische Trajektorien des Lotka-Volterra-Modells sind phasenversetzte Oszillationen (Abb. 9.4, Seite 93).

Die kartesische Divergenz (auch Euklidische, kanonische oder Standard-Divergenz genannt) eines Vektorfeldes ist die Spur der Jacobimatrix des Vektorfeldes:

$$\operatorname{div}(\mathbf{X}) = \operatorname{tr}(J(\mathbf{X})) = X_{,i}^i.$$

Die kartesische Divergenz des Lotka-Volterra-Vektorfeldes \mathbf{X} hängt offenbar von der Koordinatenwahl ab:

Koordinaten	Kartesische Divergenz
(m, n)	$\text{tr}(J(\begin{pmatrix} m(\varepsilon - \gamma n) \\ -n(\varepsilon - \gamma m) \end{pmatrix})) = \gamma(m - n)$
(q, p)	$\text{tr}(J(\begin{pmatrix} \varepsilon - \gamma e^p \\ \varepsilon - \gamma e^{-p} \end{pmatrix})) = 0$

Dies gilt allgemein für nichtlineare Koordinatentransformationen, da die Jacobi-Matrix eines Vektorfeldes keine invariante Größe ist. Im Gegensatz dazu ist folgende Definition koordinatenunabhängig:

Definition (Divergenz). *Die Divergenz des Vektorfeldes \mathbf{X} bezüglich der Volumenform Ω ist durch*

$$\text{div}_\Omega(\mathbf{X})\Omega = \mathcal{L}_\mathbf{X}\Omega = d(i_\mathbf{X}\Omega)$$

gegeben. Hier ist $\mathcal{L}_\mathbf{X}$ die Lie-Ableitung entlang \mathbf{X} und i das innere Produkt. Die kartesische Divergenz ist die Divergenz bezüglich der kartesischen Volumenform in den entsprechenden Koordinaten. Wenn ersichtlich ist, auf welche Volumenform sich die Divergenz bezieht, wird der entsprechende Index auch weggelassen.

Bildlich gesprochen ist die Divergenz die Änderung der Volumenform entlang des Vektorfeldes. Der Fluss ϕ^t eines divergenzfreien Vektorfeldes \mathbf{X} ist dann volumenerhaltend und umgekehrt:

$$(\phi^t)^*\Omega = \Omega \Leftrightarrow \text{div}(\mathbf{X}) = 0.$$

Aus dieser Definition folgt der Ausdruck für die Divergenz in beliebigen Koordinaten:

Lemma (Divergenz in Koordinaten). *Die Volumenform Ω sei in Koordinaten (z^1, \dots, z^n) gegeben:*

$$\Omega = f dz^1 \wedge \dots \wedge dz^n.$$

Diese Darstellung ist stets möglich, da die Volumenformen an einem Punkt einen eindimensionalen Vektorraum bilden. Dann ist die Divergenz eines Vektorfeldes \mathbf{X} bezüglich Ω gegeben durch

$$\text{div}_\Omega(\mathbf{X}) = X^k_{,k} + \frac{f_{,k}}{f} X^k. \quad (9.1)$$

Im Vergleich zur kartesischen Divergenz kommen also noch Terme hinzu, die von der gewählten Volumenform abhängen.

Ist beispielsweise in den Koordinaten (z^1, \dots, z^n) $\Omega = dz^1 \wedge \dots \wedge dz^n$, dann ergibt sich aus der Transformationsregel für n -Formen in den Koordinaten $(\tilde{z}^1, \dots, \tilde{z}^n)$

$$\Omega = dz^1 \wedge \dots \wedge dz^n = \underbrace{\frac{\partial(z^1, \dots, z^n)}{\partial(\tilde{z}^1, \dots, \tilde{z}^n)}}_{=f} d\tilde{z}^1 \wedge \dots \wedge d\tilde{z}^n.$$

f ist hier also die Funktionaldeterminante der Variablentransformation und ist konstant für lineare Transformationen. Entsprechend verschwindet der zweite Term in (9.1) und damit ist die kartesische Divergenz invariant unter linearen Transformationen. Am Beispiel des Lotka-Volterra-Modells wurde die Divergenz bezüglich zweier verschiedener Volumenformen berechnet, konkret bezüglich der kartesischen Volumenform Ω_{cqp} in den Koordinaten (q, p) sowie bezüglich der kartesischen Volumenform Ω_{cmn} in den Koordinaten (m, n) (der Index ‚c‘ steht hier für ‚cartesian‘). Damit erklären sich die verschiedenen Werte. Der invariante Wert resultiert, wenn die Volumenformen entsprechend (9.1) mit-transformiert wird. Die Divergenz bezüglich Ω_{cqp} in den Koordinaten (m, n) ergibt dann dasselbe Resultat wie in den Koordinaten (q, p) :

$$\begin{aligned}\Omega_{cqp} &= dq \wedge dp = \frac{\partial(q, p)}{\partial(m, n)} dm \wedge dn = -\frac{1}{mn} dm \wedge dn \\ \Rightarrow \operatorname{div}_{\Omega_{cqp}}(\mathbf{X}) &= \frac{\partial}{\partial m} X^m + \frac{\partial}{\partial n} X^n + \frac{\frac{\partial}{\partial m} (-1)}{\frac{-1}{mn}} X^m + \frac{\frac{\partial}{\partial n} (-1)}{\frac{-1}{mn}} X^n = 0.\end{aligned}$$

Als (bezüglich Ω_{cqp}) divergenzfreies System, bilden die Lotka-Volterra-Gleichungen in (q, p) sogar ein kanonisches Hamilton-System:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_q H \\ \partial_p H \end{pmatrix}, \quad H(q, p) = \varepsilon(p - q) - \gamma(e^p + e^{-q}).$$

In den Koordinaten (m, n) ist das Lotka-Volterra-Modell nichtkanonisch aber regulär. Es ist ein Beispiel für ein System, welches die Jacobi-Identität erfüllt aber das kartesische Volumen nicht erhält.

Generell stellt sich die Frage, ob für jedes beliebige System eine Volumenform existiert, bezüglich der dieses divergenzfrei ist. Das ist deswegen von Interesse, weil die Divergenzfreiheit wiederum eine notwendige Bedingung für die Existenz einer Hamiltonschen Darstellung ist. In einfachen Fällen kann diese Frage folgendermaßen beantwortet werden:

Bemerkung. Sei ein Vektorfeld \mathbf{X} in beliebigen Koordinaten (z^1, \dots, z^n) gegeben. Falls eine glatte, strikt positive Funktion f existiert, die die Differentialgleichung

$$\frac{f_{,\mu}}{f} X^\mu + X^\mu_{,\mu} = 0 \tag{9.2}$$

oder äquivalent

$$g_{,\mu} X^\mu + X^\mu_{,\mu} = 0, \quad g = \ln f \tag{9.3}$$

löst, dann ist das Vektorfeld \mathbf{X} divergenzfrei bezüglich der Volumenform

$$\Omega_f := f \Omega_c. \tag{9.4}$$

$\Omega_c = dz^1 \wedge \dots \wedge dz^n$ ist hier die kartesische Volumenform in den entsprechenden Koordinaten.

Dies folgt direkt aus Gleichung (9.1). Durch eine anschließende Transformation auf Koordinaten, in welchen Ω_f kanonisch ist, ergeben sich Vektorfeldkomponenten, die im kartesischen Sinn divergenzfrei sind. In zwei Dimensionen ist Divergenzfreiheit äquivalent mit der Existenz einer Hamiltonschen Darstellung. Wenn also eine Lösung für (9.3) bekannt ist, lässt sich damit explizit eine Hamilton-Darstellung konstruieren:

1. Löse in gegebenen Koordinaten die Gleichung (9.3). Daraus ergibt sich eine Koordinatendarstellung für Ω_f .
2. Transformiere das System auf Koordinaten, in welchen die Volumenform Ω_f kanonisch ist. In diesen Koordinaten ist das Vektorfeld im kartesischen Sinn divergenzfrei und eine Voraussetzung für die Existenz einer Hamilton-Darstellung ist erfüllt.

Beispiel (Alternative Hamilton-Darstellung des Lotka-Volterra-Modells). *Für das Lotka-Volterra-System in den Koordinaten (m, n) lautet die Volumenformgleichung (9.3)*

$$\partial_m g m(\varepsilon - \gamma n) - \partial_n g n(\varepsilon - \gamma m) = -\gamma(m - n).$$

Diese besitzt unter anderem die Lösung

$$f = e^{-\frac{\gamma}{\varepsilon}(m+n)}. \quad (9.5)$$

Die Koordinaten, in denen die damit verbundene Volumenform kartesisch ist, lauten

$$\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = -\frac{\varepsilon}{\gamma} \begin{pmatrix} e^{-\frac{\gamma}{\varepsilon}m} \\ e^{-\frac{\gamma}{\varepsilon}n} \end{pmatrix}$$

und für die Vektorfeldkomponenten ergibt sich

$$\mathbf{X} = \varepsilon \begin{pmatrix} r \ln(-\frac{\gamma}{\varepsilon}r)(1 + \ln(-\frac{\gamma}{\varepsilon}s)) \\ -s \ln(-\frac{\gamma}{\varepsilon}s)(1 + \ln(-\frac{\gamma}{\varepsilon}r)) \end{pmatrix}. \quad (9.6)$$

Dieses Vektorfeld ist divergenzfrei im kartesischen Sinn und ein kanonisches Hamilton-System mit Hamiltonfunktion

$$\tilde{H}(r, s) = -\varepsilon e^{-\frac{\gamma}{\varepsilon}(m+n)} m n = \varepsilon e^{\frac{H}{\varepsilon}}.$$

Dies ist eine alternative Hamilton-Darstellung des Lotka-Volterra-Modells, die aus der speziellen Wahl der Lösung (9.5) hervorgeht.

Die Eigenschaften des Lotka-Volterra-Modells in verschiedenen Koordinaten sind in Tab. 9.2 zusammengefasst.

Die Hamiltonfunktion \tilde{H} ist hier nur von der bereits bekannten Hamiltonfunktion abhängig, was bei zweidimensionalen Systemen immer der Fall ist. In höherdimensionalen

	$i_{\mathbf{X}}\Omega_{cqp} = dH$	$i_{\mathbf{X}}\Omega_{crs} = d\tilde{H}$
(m, n)	nichtkanonisch	nichtkanonisch
(q, p)	kanonisch	nichtkanonisch
(r, s)	nichtkanonisch	kanonisch

Tabelle 9.2: Zwei Hamilton-Darstellungen des Lotka-Volterra-Systems

Phasenräumen kann es vorkommen, dass ein System zwei unabhängige Hamilton-Darstellungen besitzt. Solche Systeme werden Bi-Hamiltonsch genannt (Olver, 1990).

Die Frage der Volumenerhaltung ist auch mit der Reversibilität verbunden. Gemäß Definition in Abschnitt 9.4 wird eine Differentialgleichung

$$\dot{z} = \mathbf{X}(z)$$

reversibel genannt, wenn eine lineare, involutive Abbildung S mit

$$S\mathbf{X} = -\mathbf{X}S$$

existiert. Bezüglich dieser Definition ist das Lotka-Volterra-Modell nur in den Koordinaten (m, n) reversibel. Reversibilität kann sich aber auch auf den Fluss einer Differentialgleichung beziehen. Eine Flussabbildung ϕ^t wird reversibel genannt, wenn es eine involutive Abbildung ρ auf dem Phasenraum gibt, für die

$$\phi^{-t} = \rho \circ \phi^t \circ \rho$$

gilt. Diese Definition ist koordinateninvariant und das Lotka-Volterra-Modell ist reversibel in dem Sinn. Als Gegensatz werde nun ein einfaches, irreversibles System betrachtet:

Beispiel (Der gedämpfte Oszillator). *Die Bewegungsgleichung des gedämpften harmonischen Oszillators lauten*

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

In den Koordinaten

$$\begin{pmatrix} r \\ \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 + y^2 \\ \arccos(\frac{x}{x^2+y^2}) \end{pmatrix}$$

ist dieses System entkoppelt

$$\begin{pmatrix} \dot{r} \\ \dot{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r \\ 1 \end{pmatrix}$$

und irreversibel. Die Volumenformgleichung lautet

$$-r\partial_r g + \partial_\phi g - 1 = 0$$

und besitzt die ‚Lösung‘ $g = -\ln r \Rightarrow f = \frac{1}{r}$. Es sind auch Lösungen mit Winkelabhängigkeit möglich, aber allen ist gemein, dass sie Unstetigkeiten aufweisen.

Die beiden aufgeführten Beispiele unterscheiden sich in einem wesentlichen Punkt: Das reversible Lotka-Volterra-Modell weist beschränkte, periodische Volumenszillationen auf und es ließ sich eine Volumenform ohne Singularität angeben, bezüglich der das prognostische Vektorfeld divergenzfrei ist. Beim irreversiblen, gedämpften harmonischen Oszillator hingegen hat die so hergeleitete Volumenform eine Singularität und ist zudem entlang Trajektorien unbeschränkt. In einem strengeren Sinn kann hier also nicht von Volumenerhaltung gesprochen werden.

	Lotka-Volterra	Gedämpfter Oszillator
Reversibilität	Ja	Nein
Volumenerhaltung	Ja	Nein

Tabelle 9.3: Reversibilität und Volumenerhaltung

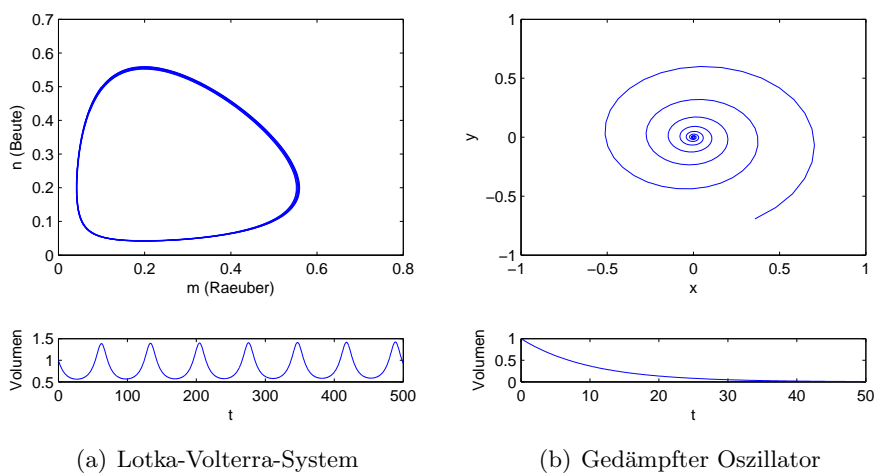


Abbildung 9.4: Trajektorien im Phasenraum

Diese Beispiele verdeutlichen, dass Divergenzfreiheit im kartesischen Sinn von den gewählten Koordinaten abhängt und auch mit der Reversibilitätseigenschaft eines Systems verbunden ist (vgl. auch folgende Abschnitte). Insbesondere wurde mit dem Lotka-Volterra-Modell in (m, n) -Koordinaten ein Beispiel für ein Hamiltonsches System gege-

ben, dessen kartesische Divergenz nicht verschwindet. Bei der Betrachtung von partiellen Differentialgleichungen oder Diskretisierungen davon wird üblicherweise mit der kartesischen Volumenform in den verwendeten Variablen gearbeitet. Das entspricht der Situation, dass alle Dimensionen homogen gewichtet werden. Wie hier gezeigt wurde, hängt die beobachtete Volumenbilanz von der Gewichtung ab. Aus der Diskussion in Abschnitt 9.4 folgt, dass charakteristische Größen, wie das zeitgemittelte Volumen oder die Reversibilität davon jedoch nicht tangiert werden.

Der Begriff der Volumenerhaltung ist auch zentral für die statistische Mechanik. Im divergenzfreien Fall gilt, dass jede stationäre Funktion f (z. B. eine Funktion, die nur von Erhaltungsgrößen abhängt) wegen

$$0 = \partial_t f = \nabla f \cdot \mathbf{X} = \nabla \cdot (f\mathbf{X}) - \underbrace{f \nabla \cdot \mathbf{X}}_{=0}$$

$$\Rightarrow \nabla \cdot (f\mathbf{X}) = 0.$$

auch die Liouville-Gleichung erfüllt und damit eine Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion ist. Das Gegenteil gilt hingegen für den Fall, dass $\text{div}\mathbf{X} \neq 0$. Bezüglich der Statistik kann also eine ähnliche Diskussion wie die obige über das Phasenraumvolumen geführt werden.

9.3.2 Das Phasenraumvolumen von Poisson- und Nambu-Systemen

In der Praxis sind viele reversible Systeme bezüglich des kartesischen Volumens erhaltend, wenn nicht lokal exakt, so doch im Mittel (Abschnitt 9.4). Abb. 9.5 zeigt das Phasenraumvolumen von zwei verschiedenen Semi-Diskretisierungen der Flachwassergleichungen. Beide weisen keine exakte Volumenerhaltung auf, stattdessen treten die bereits beim Lotka-Volterra-Modell beobachteten Oszillationen auf. Zumindest die Volumenbilanz der Nambu-Diskretisierung scheint beschränkt und im Mittel erhalten zu sein. Aus dem Vergleich mit den Beispielen im letzten Abschnitt kann in diesem Fall vermutet werden, dass eine Lösung für die Volumengleichung existiert, so dass die Erhaltung auch lokal gilt.

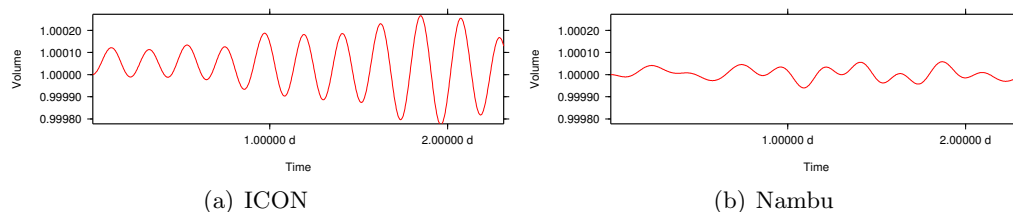


Abbildung 9.5: Volumenbilanz des Flachwassermodells

Abb. 9.5 ist gleichzeitig ein Beispiel für ein Nambu-System, welches lokal nicht volumenerhaltend ist. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie für bestimmte Spezialfälle

aus der Nambu-Darstellung eines Systems sogar auf exakte Volumenerhaltung geschlossen werden kann. Dies ist eine Verallgemeinerung der Tatsache, dass lineare Systeme mit konstantem Poisson-Tensor volumenerhaltend sind: In diesem Fall ist die Jacobi-Matrix ein Produkt aus einer symmetrischen und einer antisymmetrischen Matrix. Aus der Darstellung

$$X^\mu = B^{\mu\nu} H_{,\nu}$$

folgt dann unmittelbar die Erhaltung des kartesischen Volumens

$$\operatorname{div}_{\Omega_c} \mathbf{X} = X^\mu_{,\mu} = (B^{\mu\nu} H_{,\nu})_{,\mu} = B^{\mu\nu} H_{\nu\mu} = 0.$$

Eine ganz analoge Aussage gilt für Nambu-Systeme mit konstantem Nambu-Tensor:

Bemerkung 1. *Ein Nambu-System*

$$\begin{aligned} \partial_t z^i &= \{z^i, H, C\} \\ \{F, H, C\} &= N^{ijk} F_{,i} H_{,j} C_{,k} \end{aligned}$$

mit konstantem Nambu-Tensor N erhält das kartesische Volumen. Dies folgt aus

$$X^k = \{z_k, H, C\} = N^{kjl} H_{,j} C_{,l},$$

und damit

$$\operatorname{div}_{\Omega_c} \mathbf{X} = X^k_{,k} = (N^{kjl} H_{,j} C_{,l})_{,k} = N^{kjl} (H_{,jk} C_{,l} + H_{,j} C_{,lk}) = 0.$$

Für Systeme mit ‚diagonalem‘ Hamiltonian und Casimir, also

$$\begin{aligned} H(z) &= \sum_i \sum_r h_{ir} (z^i)^r \\ C(z) &= \sum_i \sum_r c_{ir} (z^i)^r \end{aligned}$$

gilt sogar

$$\partial_{z_i} X^i = 0 \quad (\text{ohne Summation über } i).$$

Dieser Fall trifft beispielsweise auf die barotrope Vorticitygleichung, die Eulerschen Kreisgleichung und die Lorenz-Modelle zu. Die Helizität der inkompressiblen, dreidimensionalen Dynamik nimmt hingegen in Geschwindigkeitsvariablen eine ‚nicht-diagonale‘ Form an.

Dieses Resultat ist in Tab. 9.4 noch einmal dem Poisson-Fall gegenübergestellt. Sowohl das Flachwassermodell als auch das nichthydrostatische Modell sind durch einen nichtkonstanten Nambu-Tensor dargestellt. Die in Abb. 9.5 beobachteten Fluktuationen stehen deshalb in keinem Widerspruch zu obiger Bemerkung.

Systeme mit konstantem Poisson-Tensor	Systeme mit konstantem Nambu-Tensor
Typischerweise linear	Typischerweise quadratisch
Volumenerhaltung folgt aus	
einfacher	zweifacher
Antisymmetrie.	
Bsp. Linearisiertes Hamilton-System	Bsp. Diskretisierung inkompressibler Fluidodynamik

Tabelle 9.4: Volumenerhaltung in linearen und nichtlinearen Systemen

Invariante Nambu-Volumenformen

Im letzten Unterabschnitt wurde gezeigt, wie unter bestimmten Voraussetzungen zu gegebenen Vektorfeldern Volumenformen konstruiert werden können, so dass die entsprechenden Flüsse volumenerhaltend sind. Dies kann auch auf Hamiltonsche Vektorfelder auf symplektischen (=regulären) und singulären Poisson-Mannigfaltigkeiten angewendet werden (Tab. 9.5): Im ersten Fall existiert nach dem Satz von Darboux immer eine solche invariante Volumenform. Diese ergibt sich aus der Inversion des Poisson-Tensors. Im singulären Fall trifft dies nicht zu: Zwar folgt aus der Jacobi-Identität, dass der Poisson-Tensor unter dem Fluss erhalten ist, aber daraus kann wegen der Degeneriertheit von B nicht auf Volumenerhaltung geschlossen werden. Aus einer unter Umständen vorhandenen Lösung von (9.3) ergibt sich Volumenerhaltung bezüglich dieser speziell definierten Volumenform.

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, inwiefern die Nambu-Darstellung für singuläre Systeme eine invariante Volumenform entsprechend der Liouville-Form im regulären Fall liefert. Für ein reguläres Hamiltonsystem ist die Liouville-Form Ω auf der Basis der symplektischen 2-Form ω definiert:

$$\Omega = \omega \wedge \cdots \wedge \omega.$$

Ein häufiger Fall ist, dass die symplektische 2-Form ω für das Gesamtsystem aus Formen von Teilsystemen aufgebaut wird:

$$\begin{aligned} \omega_i &= dq^i \wedge dp^i \\ \omega &= \sum_i \omega_i. \end{aligned}$$

Als Matrix geschrieben nimmt ω in diesem Fall eine Blockdiagonalform an. In der Nambu-Mechanik ist das Analogon zur symplektischen 2-Form die Nambu-3-Form ω_N . Allgemein gilt für Differentialformen α und β aus dem Bündel $\Lambda^r M$ bzw. $\Lambda^s M$ der r - bzw. s -Formen die gradierte Kommutationsregel

$$\alpha \wedge \beta = (-1)^{rs} \beta \wedge \alpha, \quad \alpha \in \Lambda^r M, \beta \in \Lambda^s M.$$

Reguläre Systeme	Singuläre Systeme
	$\{z^i, z^j\} = B^{ij}$
	$\mathbf{X}_H = \{\cdot, H\}$
$\det(B) \neq 0$	$\det(B) = 0$
$\mathcal{L}_{\mathbf{X}_H} B = 0$	
Erhaltung des Poissontensors	
Die aus dem Poisson-Tensor konstruierte invariante Liouville-Volumenform $\Omega_B = \bigwedge B^{-1}$ ist erhalten:	Falls eine Lösung f der Volumengleichung (9.3) existiert, ist das Ω_f -Volumen erhalten:
$\operatorname{div}_{\Omega_B} \mathbf{X}_H = 0.$	$\operatorname{div}_{\Omega_f} \mathbf{X}_H = 0.$

Tabelle 9.5: Volumenerhaltung von regulären und singulären Hamilton-Systemen

Also antikommutieren zwei beliebige 3-Formen im Gegensatz zu 2-Formen:

$$\begin{aligned} \alpha \wedge \beta &= \beta \wedge \alpha, & \alpha, \beta &\in \Lambda^2 M \\ \alpha \wedge \beta &= -\beta \wedge \alpha, & \alpha, \beta &\in \Lambda^3 M. \end{aligned}$$

Während die Motivation eine völlig andere ist, ist der mathematische Hintergrund vollkommen analog zu den quantenmechanischen Vertauschungsrelationen: Die Wellenfunktion einer N -Teilchen-Konfiguration aus Fermionen ändert ihr Vorzeichen unter Teilchenvertauschung im Gegensatz zur Wellenfunktion für Bosonen. Daraus wiederum folgt, dass, wenn in einem fermionischen System zwei Einzelteilchen eine identische Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion besitzen, die Wellenfunktion des Gesamtsystems identisch verschwindet. Solche Zustände treten also nicht auf; dies ist als Pauli-Prinzip bekannt.

Außer für dreidimensionale Phasenräume lässt sich aus einer Nambu-3-Form somit keine Volumenform konstruieren, da bereits das einfache äußere Produkt verschwindet:

$$\omega_N \wedge \omega_N = 0, \quad \omega_N \in \Lambda(T^3 M).$$

Alternativ kann eine Volumenform aus der ‚partiellen äußeren Ableitung‘ (Fecko, 1992) definiert werden. Dazu muss das Gesamtsystem in der Viel-Tripel-Form

$$\{F, H, E\} = \sum_i \nabla_{\mathbf{x}_i} F \cdot \nabla_{\mathbf{x}_i} H \times \nabla_{\mathbf{x}_i} E$$

vorliegen, was z. B. für Kreisel- oder Spinsysteme der Fall ist. Für die Diskretisierungen partieller Differentialgleichungen gilt das jedoch im Allgemeinen nicht. Eine Ausnahme

Symmetrie	Antisymmetrie
Symplektische 2-Form $i_{\mathbf{X}_H}\omega = dH$	Nambu-3-Form $i_{\mathbf{X}_{HE}}\omega_N = dH \wedge dE$
Bosonische Wellenfunktion	Fermionische Wellenfunktion

Tabelle 9.6: Symmetrie und Antisymmetrie

bilden die Systeme mit konstantem Nambu-Tensor. Für sie existiert nach Pandit und Gangal (1998) eine Basis, in der das System genau die erwähnte Form annimmt. Ein Beispiel hierfür ist die inkompressible Fluidodynamik in drei Dimensionen beziehungsweise Diskretisierungen davon. In drei Dimensionen liegt die Nambu-Darstellung bereits in solchen Koordinaten vor. Damit erhält eine Diskretisierung dieser Dynamik in Nambu-Form das damit verbundene Phasenraumvolumen, was bereits allgemein in Bemerkung 1 festgestellt wurde. Im Gegensatz zu den Flachwassergleichungen gilt dies exakt und für beliebige Gitter.

9.4 Das Phasenraumvolumen von Diskretisierungen

In diesem Abschnitt soll am Beispiel des ICON-Flachwasser-Prototypen sowie der Nambu-Diskretisierung der Einfluss von räumlichen und zeitlichen Diskretisierungsschemen auf die Phasenraumvolumenerhaltung und die Reversibilität (Arnold, 1989) untersucht werden. Als dissipationsfreies System weist die reibungsfreie Fluidodynamik Volumenerhaltung auf. Dies gilt nicht nur für die symplektische Lagrange-Dynamik sondern auch für die singuläre Euler-Dynamik (Arnold, 1989). Wie in vorherigen Abschnitten und in Lamb (1996) sowie Posch und Hoover (2004) diskutiert, ist die Beziehung zwischen Volumenerhaltung und Reversibilität subtil. Insbesondere folgt aus Reversibilität nicht stets Volumenerhaltung, setzt dieser aber enge Schranken, wie hier gezeigt wird.

Bei bestimmten Anwendungen kann das Phasenraumvolumenverhalten eines gegebenen dynamischen Systems und seiner numerischen Umsetzung die Resultate wesentlich beeinflussen. Eine fehlerhafte Phasenraumkontraktion oder -expansion führt beispielsweise bei Ensemble-Vorhersagen zu Auswirkungen auf die Ausbreitung der Ensemblemitglieder und die Dimension des chaotischen Attraktors (Ehrendorfer, 1994a,b). In Dubinkina und Frank (2007) wurde gezeigt, dass das Arakawa-Schema für die zweidimensionale, inkompressible Fluidodynamik volumenerhaltend ist. Hier sollen Resultate für ein allgemeineres physikalisches und numerisches Modell diskutiert werden.

Für diese Analyse wird der Diskretisierungsprozess in räumliche (z. B. finite Differenzen, finite Volumen) und zeitliche (z. B. implizite Mittelpunkregel, Leap-frog) Diskretisierung unterteilt. Damit wird eine partielle Differentialgleichung (PDE) in eine

gewöhnliche Differentialgleichung (ODE) und schließlich in eine algebraische Differenzengleichung (AE) überführt.

9.4.1 Volumenerhaltung und Zeit-Reversibilität unter räumlichen Diskretisierungen

Die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{z} = \mathbf{X}(z) \quad (9.7)$$

sei eine räumliche diskretisierte Approximation der gegebenen partiellen Differentialgleichung

$$\dot{z} = \mathbf{X}_{\text{PDE}}[z]. \quad (9.8)$$

Die dieser ODE zugeordnete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\rho(z(t), t)$ erfüllt definitionsgemäß die Liouville-Gleichung:

$$\partial_t \rho = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{X}) \quad \text{bzw.} \quad \frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div}(\mathbf{X}). \quad (9.9)$$

Diese kann als Erhaltungsgleichung für die Wahrscheinlichkeit p , das System in einem mitbewegten Phasenraumvolumen $V(t)$ zu finden, interpretiert werden:

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\int_{V(t)} dV \rho}_{=: p} = 0. \quad (9.10)$$

Lokal gilt $dp = \rho dV$, also ist das Phasenraumvolumen stets antiproportional zur Dichte ρ . Im Folgenden ergibt sich das Volumen jeweils als Inverses der Dichte.

Im Allgemeinen braucht die Divergenz der diskretisierten Gleichung (9.7) nicht gleich derjenigen der Feldgleichung (9.8) zu sein. Die Differenz zwischen beiden definiert die Ordnung der Genauigkeit einer spezifischen räumlichen Diskretisierung:

$$\operatorname{div}(\mathbf{X}_{\text{PDE}}) = \operatorname{div}(\mathbf{X}) + \mathcal{O}(\Delta x^r). \quad (9.11)$$

Sie ist üblicherweise gleich der Ordnung der räumlichen Differenzenquotienten des verwendeten Schemas.

Eine partielle Differentialgleichung (9.8) wird zeitreversibel genannt, wenn es eine lineare Transformation S der Variablen gibt, so dass $S = S^{-1}$ und

$$\mathbf{X}_{\text{PDE}}(Sz) = -S\mathbf{X}_{\text{PDE}}(z).$$

Entsprechend heißt die gewöhnliche Differentialgleichung (9.7) zeitreversibel, wenn

$$\mathbf{X}(Sz) = -S\mathbf{X}(z).$$

Außer für die Advektionsterme ist die Zeit-Reversibilität einer partiellen Differentialgleichung bei einer Diskretisierung verhältnismäßig einfach zu gewährleisten (Egger, 1996). Hier sei diese Bedingung als erfüllt angenommen.

Als Hamilton-Systeme weisen sowohl die Flachwassergleichungen als auch die inkompressiblen Euler-Gleichungen verschwindende Phasenraumdivergenz auf. Im Allgemeinen ist es nicht möglich, die Hamilton-Struktur von fluiddynamischen Systemen während einer Diskretisierung zu erhalten. Obschon die Antisymmetriebedingung mit geeigneten Methoden (z. B. mit der in dieser Arbeit verwendeten) übertragen werden kann, gilt dies nicht für die Jacobi-Identität. Eine bemerkenswerte Ausnahme bildet hier die Trunkierung der Spektraldarstellung der inkompressiblen, zweidimensionalen Fluidmechanik von Zeitlin (1991). Wie in vorherigen Abschnitten diskutiert, kann in besonderen Fällen Volumenerhaltung auch ohne Jacobi-Identität gewährleistet werden. Die Arakawa-Diskretisierung der Euler-Gleichungen für das inkompressible, zweidimensionale Fluid beispielsweise erhält das Phasenraumvolumen exakt (Dubinkina und Frank, 2007). Zeitreversibilität führt jedoch nicht zwangsweise zu Volumenerhaltung (Lamb, 1996). Dies wird in Abschnitt 9.4.4 diskutiert.

9.4.2 Volumenerhaltung und Zeit-Reversibilität unter zeitlichen Diskretisierungen

Im Folgenden wird die Genauigkeit von verschiedenen Zeitschritt-Methoden für lineare Systeme untersucht. Die Experimente mit den nichtlinearen Flachwassergleichungen in Abschnitt 9.4.5 bestätigen teilweise diese lineare Analyse, zeigen aber auch wichtige Diskrepanzen auf. Die gewöhnliche Differentialgleichung (9.7) sei also linear angenommen:

$$\dot{z} = \mathbf{X} = Az. \quad (9.12)$$

Hier ist A die Jacobi-Matrix des prognostischen Vektorfeldes. Damit ist die Phasenraumdivergenz

$$\operatorname{div}(\mathbf{X}) = \operatorname{tr}(A)$$

konstant. Sei M die für einen Algorithmus spezifische diskrete Flussabbildung, die die prognostischen Variablen $z_i = z(t_i)$ von Zeitschritt i auf den Zeitschritt $i + 1$ abbildet:

$$M : z_i \mapsto Mz_i = z_{i+1}. \quad (9.13)$$

Gemäß Annahme (9.10) ist die Wahrscheinlichkeit p konstant in einem mitbewegten Kontrollvolumen, so dass

$$\int_{V_{i+1}} dV_{i+1} \rho(z_{i+1}, t_{i+1}) = \int_{V_i} dV_i \rho(z_i, t_i).$$

Die linke Seite kann mit der Transformationsformel für Integrale umgeformt werden:

$$\int_{V_{i+1}} dV_{i+1} \rho(z_{i+1}, t_{i+1}) = \int_{V_i} dV_i \rho(Mz_i, t_{i+1}) \det(M),$$

so dass

$$\rho_{i+1} \det(M) = \rho_i. \quad (9.14)$$

Hier wurde die Abkürzung $\rho_i := \rho(z_i, t_i)$ verwendet. Als diskrete Flussabbildung eines Zeitintegrationsschemas s -ter Ordnung erfüllt M

$$M = \exp(\Delta t A + \mathcal{O}(\Delta t^{s+1})).$$

Außerdem kann (9.14) als diskrete Liouville-Gleichung geschrieben werden:

$$\frac{\rho_{i+1} - \rho_i}{\Delta t} = -\frac{\rho_i}{\Delta t} \left(1 - \frac{1}{\det M}\right) \quad (9.15)$$

$$= -\frac{\rho_i}{\Delta t} (1 - \exp(-\text{tr}(\Delta t A + \mathcal{O}(\Delta t^{s+1}))))). \quad (9.16)$$

Ein Vergleich mit der exakten Lösung

$$\frac{\hat{\rho}_{i+1} - \rho_i}{\Delta t} = -\frac{\rho_i}{\Delta t} (1 - \exp(-\text{tr} A \Delta t)) \quad (9.17)$$

zeigt, dass die Genauigkeit der Volumenerhaltung ebenfalls s ist. Während s die Genauigkeit der Volumentendenz ist (globale Genauigkeit), beträgt die Genauigkeit des Volumenverhältnisses zwischen zwei Zeitschritten $s + 1$ (lokale Genauigkeit).

Zeitreversible Systeme

Wie im Folgenden gezeigt wird, ist die Volumenerhaltung für lineare Systeme (9.12) eng mit der Erhaltung der Reversibilität unter einer numerischen Zeitintegrationsmethode (9.13) verbunden ist.

In einer für die Fluidodynamik typischen Situation sind die nichtlinearen Gleichungen invariant unter Zeitumkehr und das zugehörige lineare System (9.12) erfüllt

$$SA = -AS, \quad (9.18)$$

wobei S das Vorzeichen der Geschwindigkeitskomponenten ändert. Daraus folgt, dass die Eigenwerte von A mit paarweise gegensätzlichem Vorzeichen auftreten, denn

$$SA\mathbf{v} = \lambda S\mathbf{v} = -AS\mathbf{v}.$$

Sofern A diagonalisierbar ist, folgt daraus, dass A eine spurlose Matrix ist. Damit sind im linearen Fall Zeitreversibilität und Volumenerhaltung äquivalent. Wenn eine diskrete Flussabbildung

$$z_{i+1} = Mz_i$$

der zugehörigen Symmetrie

$$SM = M^{-1}S \quad (9.19)$$

genügt, folgt $\det M = 1$ und das Volumen ist erhalten. Bedingung (9.19) ist für symmetrische Runge-Kutta-Verfahren wie die Mittelpunkt-/Trapezregel erfüllt. Für nichtsymmetrische Methoden wie explizites und implizites Euler-Schema sowie das oft verwendete

Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung gilt das hingegen nicht (Leimkuhler und Reich, 2004; Hairer et al., 2006).

Die Situation wird für allgemeine nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichungen mit Zeitsymmetrien komplizierter. In Reich (1999) wird gezeigt, dass symmetrische Runge-Kutta-Methoden als ‚exakte‘ Lösungen einer modifizierten gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\dot{z} = \widehat{\mathbf{X}}_{\Delta t}(z)$$

interpretiert werden können. Diese erfüllt hier

$$S\widehat{\mathbf{X}}_{\Delta t}(z) = -\widehat{\mathbf{X}}_{\Delta t}(Sz),$$

d. h. die modifizierte Differentialgleichung ist auch zeitreversibel. Da im nichtlinearen Fall aber aus Zeitreversibilität nicht auf Volumenerhaltung geschlossen werden kann, gilt das auch für entsprechende numerische Methoden. Dies wird im folgenden Abschnitt sowie Abschnitt 9.4.5 weiter diskutiert.

9.4.3 Volumenerhaltung und Lyapunov-Exponenten

Die Lyapunov-Exponenten $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ eines N -dimensionalen dynamischen Systems 9.7 sind folgendermaßen definiert:

$$\lambda_j = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \sigma_j(x, t),$$

Hier sind $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ die Singulärwerte der Jacobi-Matrix der Flussabbildung. Die Summe der Lyapunov-Exponenten erfüllt

$$\sum_j \lambda_j = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \operatorname{div} \mathbf{X}(z(t')) dt', \quad (9.20)$$

was für ergodische Systeme gleich dem Ensemble-Mittel ist. Für ein zeit-diskretisiertes System $z_{i+1} = \phi(z_i)$ ergibt sich entsprechend

$$\sum_j \lambda_j = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \sum_{i=0}^{k-1} \ln |\det J_z(\phi(z_i))| = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \ln \prod_{i=0}^{k-1} |\det J_z(\phi(z_i))|,$$

wobei $J_z(\phi(z))$ den Jacobian von ϕ an der Stelle z bezeichnet. Daraus folgt

$$e^{\sum_j \lambda_j} = \lim_{k \rightarrow \infty} \prod_{i=0}^{k-1} |\det J_z(\phi(z_i))|^{\frac{1}{k}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{\frac{\rho_0}{\rho_k}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \overline{\left\{ \frac{\rho_i}{\rho_{i+1}} \right\}_{0 \leq i \leq k-1}}. \quad (9.21)$$

Hier bezeichnet der Überstrich das geometrische Mittel. Es wird angenommen, dass sich die Orientierung nicht ändert, was für ausreichend kleine Δt der Fall ist.

Konservative Systeme erhalten das Phasenraumvolumen und infolgedessen ist die Summe der Lyapunov-Exponenten gleich Null. Für Systeme mit Volumenkontraktion

oder -expansion, nimmt die Summe negative bzw. positive Werte an. Die Summe ist auch Null für zeitreversible Systeme.³ Deshalb folgt aus (9.20), dass das Phasenraumvolumen im langfristigen Mittel erhalten ist, solange die Zeitreversibilität gewährleistet ist, auch wenn lokal das prognostische Vektorfeld nicht divergenzfrei ist. Dasselbe gilt auch für das zeitlich diskretisierte System. Mit anderen Worten wird für ein symmetrisches Zeitintegrationsschema in der Anwendung auf eine reversible Raum-Diskretisierung erwartet, dass lokale Volumen-Fluktuationen im langfristigen Mittel keinen Trend aufweisen.

9.4.4 Experimente mit räumlichen Diskretisierungsschemen

In diesem Abschnitt werden verschiedene Diskretisierungen der Flachwassergleichungen auf dem ICON-Gitter bezüglich ihrer Volumenerhaltung verglichen. Zusätzlich zum ICON-Schema und dem Nambu-Schema wird das Helmholtz-Schema untersucht. Dieses verwendet ebenfalls Vorticity und Divergenz als prognostische Größen, jedoch nicht in einer konservativen Form wie das Nambu-Schema.

Die Phasenraumvolumenkontraktion des Nambu-Schemas kann explizit berechnet werden. Gemäß Bemerkung 1 (Seite 95) ist die Divergenz für kanonische Nambu-Schemen (das heißt solche mit konstantem Nambu-Tensor) Null. Hier braucht also lediglich der Anteil, der durch die Nichtkanonizität zustande kommt, berechnet zu werden. Dies sind die Terme, die sich aus der gemischten Klammer ergeben.

Sei N_{hex} die Anzahl der Fünf- und Sechsecke und N_{tri} die Anzahl der Dreiecke und seien

$$(z_1, \dots, z_N) = (\zeta_1, \dots, \zeta_{N_{\text{hex}}}, \mu_1, \dots, \mu_{N_{\text{tri}}}, h_1, \dots, h_{N_{\text{tri}}})$$

die Variablen des $N = N_{\text{tri}} + 2N_{\text{tri}}$ -dimensionalen Phasenraumes. Für den Beitrag der Vorticity in der gemischten Klammer ergibt sich

$$\sum_{j=1}^{N_{\text{hex}}} X_{,j}^j = \sum_{\nu} \frac{\partial}{\partial \zeta_{\nu}} \{\zeta_{\nu}, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta \mu h}^{\pi_1} = \frac{2}{9} \sum_l \frac{\lambda_l}{\delta_l} \partial_l^{\perp} \gamma \frac{1}{\partial_l^{\perp} \bar{q}} \widetilde{q\left(\frac{1}{A_{\nu} \bar{h}_{\nu}}\right)}_l, \quad (9.22)$$

und für die Höhe in der gemischten Klammer

$$\sum_{j=N_{\text{hex}}+N_{\text{tri}}+1}^{N_{\text{hex}}+2N_{\text{tri}}} X_{,j}^j = \sum_{\nu} \frac{\partial}{\partial h_i} \{h_i, \mathcal{H}, \mathcal{E}\}_{\zeta \mu h}^{\pi_3} = -\frac{2}{9} \sum_l \frac{\lambda_l}{\delta_l} \partial_l^{\perp} \gamma \frac{1}{\partial_l^{\perp} \bar{q}} q\left(\frac{1}{A_{\nu} \bar{h}_{\nu}}\right)_l. \quad (9.23)$$

Damit gilt insgesamt

$$\text{div}(\mathbf{X}_{\text{Nambu}}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{hex}}+2N_{\text{tri}}} X_{,j}^j = \frac{2}{9} \sum_l \frac{\lambda_l}{\delta_l} \partial_l^{\perp} \gamma \frac{1}{\partial_l^{\perp} \bar{q}} \left(\widetilde{q\left(\frac{1}{A_{\nu} \bar{h}_{\nu}}\right)}_l - q\left(\frac{1}{A_{\nu} \bar{h}_{\nu}}\right)_l \right). \quad (9.24)$$

Als Differenz des Produktes der Mittelung und der Mittelung des Produktes ist die Divergenz dieser räumlichen Semi-Diskretisierung ungleich Null. Selbst ein perfekt volumenerhaltendes Zeitintegrationsverfahren würde also die Erhaltung nicht wiedergeben.

³Eine spezielle Ausnahme hiervon sind Systeme mit einer starken lokalen Verletzung der Volumenerhaltung, was zur Existenz niedrig-dimensionaler Attraktoren und Repellen führt (Posch und Hoover, 2004).

Diese Inkonsistenz ist durch die Kompressibilität und die Gitterinhomogenität bedingt. Ansonsten ist das Schema aus den selben Gründen wie das Arakawa-Schema divergenzfrei (Dubinkina und Frank, 2007). Im Folgenden wird gezeigt, dass die beobachteten Fluktuationen klein sind im Vergleich mit Volumenänderungen durch die Zeitdiskretisierung. Wie oben diskutiert führt die Reversibilität außerdem dazu, dass kein unbeschränktes Wachstum beobachtet wird. Ein Resultat, welches durch Abb. 9.5 (Seite 94) bestätigt wird.

Um die Resultate unabhängig von der Anzahl Gitterpunkte N zu halten, wird anstelle des Volumenverhältnisses das geometrische Mittel der Längenexpansion bzw. -kontraktion dargestellt:

$$\Lambda_{i,j} := \sqrt[N]{\frac{\rho_j}{\rho_i}}.$$

Dies entspricht einer typischen Länge eines Kontrollvolumens im Phasenraum oder dem geometrischen Mittel der Ensemblevariation. Die Beziehung zu den Lyapunov-Exponenten ergibt sich aus (9.21).

$$e^{\frac{1}{N} \sum_j \lambda_j} = \lim_{k \rightarrow \infty} \overline{\{\Lambda_{i,i+1}\}_{0 \leq i \leq k}}. \quad (9.25)$$

Allerdings kann selbst für erhaltenes Gesamtvolumen die Variation in den einzelnen Dimensionen sehr groß sein, wenn sich das Volumen verformt. Das ist bei nichtlinearen Systemen typischerweise der Fall.

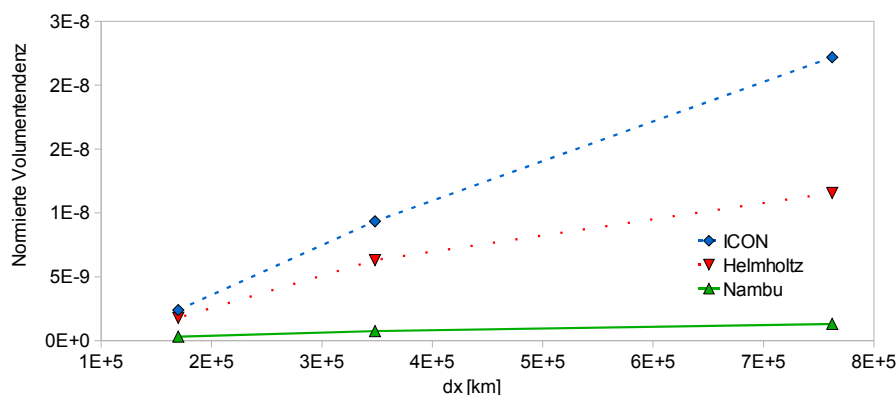


Abbildung 9.6: Längentendenz gegen Gitterkonstante. ICON- (gestrichelt), Helmholtz- (gepunktet) und Nambu- (ausgezogen) Schema.

Die mittlere Längentendenz $\frac{1}{N} \text{div}(\mathbf{X})$ ist in Abb. 9.6 für drei verschiedene Raumdiskretisierungen gegen die Gitterkonstante aufgetragen. Da für die Berechnung dieser Tendenzen die Determinante einer $N \times N$ -Matrix berechnet werden muss, wurden nur drei verschiedene Werte ermittelt (entsprechend $N = N_{\text{hex}} + 2N_{\text{tri}} = 802, 3202, 12802$). Wie oben ergibt sich, dass alle drei Schemen nicht exakt divergenzfrei sind. Immerhin konvergieren die Werte und sind im Vergleich zu den Inkonsistenzen der Zeitdiskretisierung sehr klein.

9.4.5 Experimente mit zeitlichen Diskretisierungsschemen

In diesem Abschnitt werden verschiedene Integrationsregeln für gewöhnliche Differentialgleichungen bezüglich ihrer Volumenerhaltung untersucht. Als Raumdiskretisierung wurde das ICON-Schema gewählt, die Ergebnisse sind aber denjenigen der anderen Schemen sehr ähnlich. Die räumliche Auflösung lag bei 800 km, was der niedrigsten Auflösung im vorherigen Abschnitt entspricht.

Implizite Mittelpunkregel

Die implizite Mittelpunkregel

$$z_{i+1} = \phi(z_i) = z_i + \Delta t \mathbf{X} \left(\frac{z_{i+1} + z_i}{2} \right)$$

ist symmetrisch und erhält das Volumen demzufolge zu einem sehr hohen Grad, sofern die integrierte ODE reversibel ist (Egger, 1996). Hier wird experimentell gezeigt, dass diese Erhaltungseigenschaft sehr gut, jedoch nicht exakt wiedergegeben wird. In Hairer et al. (2006) wird nachgewiesen, dass verschwindende Phasenraumdivergenz kein hinreichendes Kriterium für Volumenerhaltung mit diesem Schema ist. Wie in Abschnitt 9.4.2 diskutiert wurde, gilt die exakte Erhaltung für lineare, zeitreversible Systeme, da auch das implizite Mittelpunktschema reversibel ist. Für allgemeine, reguläre Hamilton-Systeme kann Volumenerhaltung auch durch die Verwendung von symplektischen Zeitintegrationsmethoden erreicht werden (Leimkuhler und Reich, 2004; Hairer et al., 2006). Eine Anwendung einer solchen Methode für die Flachwassergleichungen auf der Sphäre wird in Frank und Reich (2004) vorgestellt.

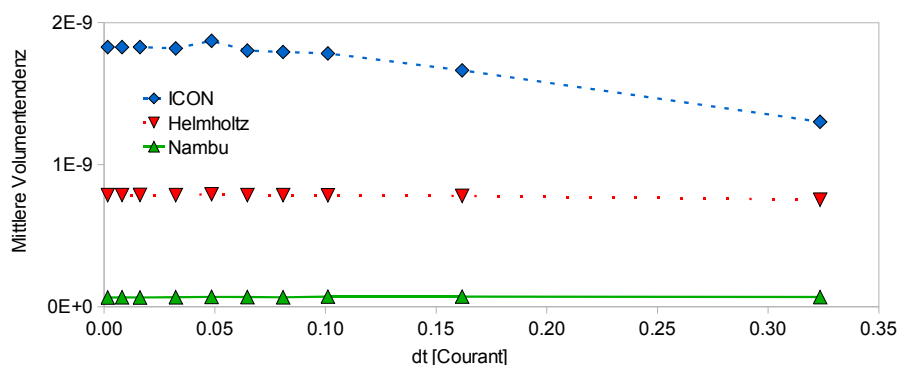


Abbildung 9.7: Mittlere Längentendenz für die implizite Mittelpunkregel. ICON- (gestrichelt), Helmholtz- (gepunktet) und Nambu- (ausgezogen) Schema.

Die mittlere Längentendenz gemäß (9.15) gegen Zeitschrittgröße ist in Abb. 9.7 abgebildet. Für dieses spezielle Zeitverfahren ist der räumliche Einfluss offenbar dominierend.

Leap-frog-Methode

Wie in Egger (1996) gezeigt wird, ist das ungefilterte Leap-frog-Schema symmetrisch und erhält das Volumen im erweiterten Phasenraum. Dies gilt sogar für nicht-reversible Systeme. Um das Auftreten der rechnerischen Mode zu unterdrücken, wird das Leap-frog-Verfahren oft durch einen Asselin-Filter ergänzt. Dadurch wird das Schema asymmetrisch und die Volumenkontraktionsrate ergibt sich zu

$$\frac{\rho_{i+1}}{\rho_i} = (1 - 2\gamma)^{-N},$$

wobei γ der Asselin-Parameter und N die Anzahl Gitterpunkte ist. Die zugehörige diskrete Liouville-Gleichung lautet

$$\frac{\rho_{i+1} - \rho_i}{\Delta t} = -\frac{\rho_i}{\Delta t} (-2N\gamma + \mathcal{O}(\gamma^2)).$$

Diese ist unabhängig vom erzeugenden Vektorfeld und von der Zeitschrittgröße. Für typische Werte ($\gamma = 0.02$) wird das Phasenraumvolumen beträchtlich kontrahiert (vgl. Abb. 9.8).

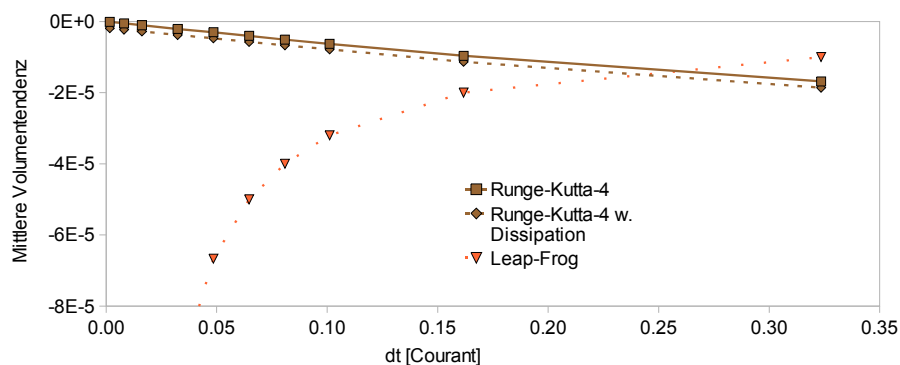


Abbildung 9.8: Mittlere Längentendenz für nichtreversible Zeitintegratoren. Leap-frog- (gepunktet) und Runge-Kutta-4-Verfahren (reibungsfrei: ausgezogen, reibungsbehaftet: gestrichelt).

Runge-Kutta-Schema vierter Ordnung

Während für die linearisierten Gleichungen Volumenerhaltung mit diesem Schema von vierter Ordnung Genauigkeit ist, zeigen die Ergebnisse eines Experimentes mit den nicht-linearen Gleichungen ein anderes Bild (vgl. Abb. 9.8). Verglichen mit den Resultaten der symmetrischen, impliziten Mittelpunkregel, weist das explizite Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung starke Volumenkontraktion auch für kleine Zeitschrittgrößen auf. Um eine Idee von der Stärke dieses Phänomens zu geben, sind auch Resultate mit demselben Schema und zusätzlicher Reibung der Form $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$ ($\nu = 10 \frac{\text{km}^2}{\text{s}}$, entspricht einer e -folding-Zeit der kleinsten auf dem Gitter darstellbaren Wellenvektoren von einem halben Tag)

in den Bewegungsgleichungen abgebildet. Wie erwartet führt die Dissipation zu einer zusätzlichen Kontraktion. Über den gemessenen Zeitraum werden 1 Promille Energie, aber 3 Prozent Volumen dissipiert. Während die Volumenkontraktion durch die Reibung wesentlich stärker ist als der Einfluss der räumlichen Diskretisierungsschemen, ist sie klein verglichen mit dem Einfluss der Zeitintegration. Das zeigt, dass die Verletzung der Volumenerhaltung durch ein numerisches Schema vergleichbar oder sogar größer sein kann als die Einflüsse der involvierten physikalischen Prozesse.

Kapitel 10

Zusammenfassung, Interpretation und Ausblick

10.1 Zusammenfassung und Interpretation

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit können die in Kapitel 1 gestellten Fragen wie folgt beantwortet werden:

Die von Salmon (2005) vorgeschlagene Methode zur Konstruktion von konservativen Diskretisierungsschemen ist offenbar flexibel genug, um auch auf sehr allgemeine Gitter, wie das hier verwendete versetzte, geodätische Dreiecks-Gitter angewendet zu werden. Gerade die Dreiecksstruktur hat sich bei der Kürzung der Singularität der Nambu-Darstellung für die Flachwassergleichungen als wesentlich erwiesen. Die Eigenschaften des so konstruierten Schemas entsprechen einer in dieser Form neuen Kombination aus den Vorteilen des Gitters und denjenigen von konservativen Schemen. Unmittelbar aus der Konstruktionsmethode folgen die Erhaltungseigenschaften für die konstituierenden Größen Gesamtenergie und potentielle Enstrophie. Die Erhaltung durch die räumliche Semi-Diskretisierung ist dabei algebraisch (d. h. bis auf Maschinengenauigkeit) exakt. Damit kann der globale Fehler der Erhaltung der potentiellen Enstrophie gegenüber einem nichtkonservativen Schema (hier ICOSWP) wesentlich, in Kombination mit einem symmetrischen Zeitintegrationsverfahren sogar um den Faktor 10^3 reduziert werden.

Eng verbunden mit der semidiskreten Erhaltung der potentiellen Enstrophie ist die Stabilitätseigenschaft. Dem ICON-Flachwasser-Prototyp ist, wie anderen nichtkonservative Schemen, die nichtlineare numerische Instabilität eigen. Durch zu starken spektralen Fluss hin zu den kleinsten Skalen tritt typischerweise binnen weniger Tage Integrationszeit eine Instabilität auf. Während für einige spezielle Systeme und Gitter Lösungen für dieses Problem in Form von konservativen Schemen existieren (Arakawa, 1966; Arakawa und Lamb, 1981), steht eine solche für den allgemeinen Fall noch aus. Das hier untersuchte Verfahren ist ein Schritt in diese Richtung. Selbst in Fällen gänzlich ohne oder mit sehr schwacher Dissipation ist das Nambu-Schema bezüglich der nichtlinearen Instabilität absolut stabil.

In Experimenten mit sehr verrauschten Anfangsbedingungen ergab das Nambu-

Schema ein Spektrum mit mehr kinetischer Energie in den großen und weniger in den kleinen Skalen als das ICOSWP-Schema. Dies kann direkt auf eine realistischere Darstellung des spektralen Energieflusses zurückgeführt werden und entspricht der Theorie von Kolmogorov (1941) für die inverse Energiekaskade im inkompressiblen Fall. Das hier hergeleitete konservative Schema hat demnach im Vergleich mit einer üblichen Diskretisierung eine Wirkung sowohl auf die kleine wie auch auf die globale Skala.

Insgesamt kann gesagt werden, dass im untersuchten Fall das Nambu-Schema die Erwartungen erfüllt. Bezüglich des rechnerischen Aufwands ist es wesentlich aufwändiger als vergleichbare Schemen. Im praktischen Fall ist daher eine Prioritätensetzung nötig. Auch sind moderne Wetter- und Klimavorhersagemodelle durchwegs dreidimensional, wodurch die Situation eine qualitativ andere ist. In hydrostatischen Modellen ist gemäß Abschnitt 8.3 noch eine gewisse Ähnlichkeit mit der zweidimensionalen Dynamik vorhanden. Im nichthydrostatischen Fall dagegen kommt die inhärent dreidimensionale Größe Helizität ins Spiel. Zudem sind dort nicht alle konstituierenden Größen auch Erhaltungsgrößen und eine Nambu-Darstellung mit der konstituierenden Erhaltungsgröße Ertelsche potentielle Enstrophie ist bislang nicht gefunden worden und gemäß Abschnitt 9.1 auch nicht in einfacher Form zu erwarten.

Mit der Ergänzung der Energie-Wirbel-Theorie um Schichtmodelle wurde gezeigt, dass sich der Charakter der Nambu-Darstellung aus der Vorticitygleichung und den Flachwassergleichungen auf weitere meteorologische Modellsysteme fortsetzt. Die Wirbeldynamik ist schichtweise analog und die Wechselwirkung findet über die Hamilton-Funktionale potentielle sowie innere Energie statt. Auch in zwei trunkierten Spektralmodellen, dem Lorenz'86-Modell sowie der resonanten Wellentriade konnte eine Nambu-Struktur nachgewiesen werden.

Im Übrigen wurden die algebraischen und geometrischen Aspekte von Systemen in Nambu-Darstellung untersucht. Dies sind neben den Erhaltungseigenschaften zwei charakteristische Interpretationen der klassischen Hamilton-Mechanik, aus der die Nambu-Mechanik als Verallgemeinerung hervorgeht. Für fluiddynamische Systeme wurde die Antisymmetrieeigenschaft des Nambu-Tensors in Verbindung mit der Dimension des betrachteten Gebietes gebracht. Da eine Antisymmetrie stets aus den Randbedingungen folgt, ergab sich für die zweidimensionale Fluiddynamik, dass eine einfache Nambu-Darstellung bevorzugt in abgeleiteten Variablen (z. B. Vorticity und Divergenz) auftritt. Numerisch effizienter wäre eine Formulierung in ursprünglichen Variablen, in denen die Notwendigkeit der Rekonstruktion entfällt. Aus Dimensionsgründen ergeben sich dabei jedoch zwingenderweise Singularitäten, deren Kürzung wiederum umständlich sein kann. Für die dreidimensionale Dynamik dagegen kommen sowohl ursprüngliche als auch abgeleitete prognostische Größen in Frage und die Antisymmetrien sind von lokaler Natur wie z. B. im Spatprodukt.

In der algebraischen Interpretation von dynamischen Systemen sind die Erhaltungseigenschaften mit den Antisymmetrien der entsprechenden Klammer verbunden. Hier konnte eine Beziehung zwischen den algebraischen Eigenschaften der Poisson-Klammer und dem in der Nambu-Klammer verwendeten Casimir aufgezeigt werden. Auf gängige Diskretisierungen von partiellen Differentialgleichungen ist dieses Resultat jedoch wegen der Schwierigkeiten beim Umsetzen der Jacobi-Identität nicht anwendbar. An Beispielen

wurde vorgeführt, dass keine äquivalente Beziehung zwischen halbeinfachen Lie-Algebren und der Nambu-Form, wie sie in der Energie-Wirbel-Theorie verwendet wird, besteht.

Die phasenraumgeometrischen Eigenschaften der Nambu-Mechanik können bezüglich zweier verschiedener Volumenbegriffe formuliert werden: Für das invariante Liouville-Volumen ergeben sich aus der Nambu-Darstellung nur unter sehr speziellen Annahmen Verallgemeinerungen der entsprechenden Aussagen über die Hamilton-Darstellung. Der Grund hierfür ist, dass sich aus dem Nambu-Tensor wegen der Vertauschungsrelationen von 3-Formen kein Analogon zur Liouville-Volumenform bilden lässt. Eine Ausnahme sind Systeme, deren Nambu-Form auf natürliche Weise in entkoppelte Einzelformen zerfällt. Dies ist unter anderem für die dreidimensional inkompressible Fluidodynamik der Fall, wobei die Einzelformen der Volumenform im Ortsraum entsprechen. Für das kartesische Volumen ergibt sich hingegen eine Verallgemeinerung gegenüber der Hamilton-Darstellung. Entsprechend Systemen mit konstantem Poisson-Tensor, das sind unter anderem die linearen Systeme, gilt auch für Systeme mit konstantem Nambu-Tensor die kartesische Volumenerhaltung. Damit kann eine Aussage über das Phasenraumvolumenverhalten von typischerweise quadratischen Systemen getroffen werden. Das hier hauptsächlich betrachtete Flachwassermodell fällt jedoch aufgrund seiner Singularitäten nicht in diese Kategorie.

Als numerische Anwendung der geometrischen Interpretation wurde anhand der Flachwassergleichungen das Phasenraumvolumenverhalten für verschiedene Diskretisierungsschemen auf dem ICON-Gitter untersucht. Von den räumlichen Approximationen stellt sich keine als divergenzfrei heraus, was durch die Variablenversetzung sowie die Gitterinhomogenitäten bedingt ist. Die Fehler sind jedoch im Vergleich klein und haben einen oszillatorischen, beschränkten Charakter. Mit der Argumentation aus den vorherigen Abschnitten sowie der Beobachtung, dass lineare, reversible Systeme im zeitlichen Mittel volumenerhaltend sind, ergibt sich die Vermutung, dass diese Inkonsistenz keinen wesentlichen Einfluss auf das Gesamtverhalten hat. Bezüglich der Zeitintegration ergab sich, dass nur die symmetrische implizite Mittelpunkregel der Volumenerhaltung nahekommt. In Kombination mit einer reversiblen (aber nicht notwendigerweise divergenzfreien) Raumdiskretisierung folgt daraus Volumenerhaltung im zeitlichen Mittel. Die beiden anderen untersuchten Schemen zeigten signifikante Volumenkontraktionen, welche die Effekte der Raumdiskretisierung und sogar diejenigen von Reibung bei weitem übertreffen können. Obschon die Phasenraumvolumenerhaltung eine abstrakte Eigenschaft eines dynamischen Systems ist, kann der Grad an numerischer Umsetzung wesentliche Effekte auf die Resultate von Ensemble-Vorhersagesystemen haben. So verursachen möglicherweise die oben erwähnten Phasenraumkontraktionen bei der Verwendung von nicht-reversiblen Verfahren einen systematischen Fehler in der Ensemblevariation.

10.2 Ausblick

Im Hinblick auf die weitere Entwicklung des nichthydrostatischen ICON-Modells wird derzeit ein zur Nambu-Diskretisierung vergleichbarer Ansatz verfolgt (Gassmann und Herzog, 2008). Die Motivation ist dabei jedoch allgemeiner als hier: Das nichthydrosta-

tische Modell zeichnet sich durch ein von zweidimensionalen Modellen völlig verschiedenes Turbulenzverhalten aus und wird durch die Helizität konstituiert. Diese ist nur in barotropen Zuständen auch eine Erhaltungsgrößen und somit unterscheidet sich auch die Nambu-Darstellung strukturell von derjenigen des Flachwassermodells. Der direkte Zusammenhang zwischen der Erhaltung der potentiellen Enstrophie und dem Auftreten der nichtlinearen, numerischen Instabilität ist bei solchen dreidimensionalen Systemen nicht mehr gegeben. Mit diesem Modell werden somit Experimente möglich, die zeigen werden, welchen Einfluss diese allgemeinere Form der Nambu-Mechanik auf die Gesamtdynamik hat. Ein weiterer Aspekt, der so experimentell untersucht werden kann, ergibt sich aus obiger Diskussion: Der Nambu-Tensor einer Diskretisierung der nichthydrostatischen Gleichung ist zwar nicht konstant, hängt jedoch nur von der Dichte ab. Diese ist im Wesentlichen durch die hydrostatische Grundgleichung gegeben und zeigt nur ‚kleine‘ dynamische Varianz. Es kann für diesen Fall also mit einer im Vergleich zu herkömmlichen Schemen verbesserter Volumenerhaltung gerechnet werden.

Aufgrund des hier nachgewiesenen dominanten Einflusses der Reversibilität auf die Volumenerhaltung, ergibt sich auch für praktische Anwendungen diesbezüglich weiteren Diskussionsbedarf. Von Staniforth et al. (2007), Reich (2006) sowie Hundertmark und Reich (2007) wurden Zeitschrittverfahren vorgeschlagen, die die günstigen Eigenschaften von symmetrischen Schemen bezüglich Volumenerhaltung und Reversibilität mit der Effizienz von semi-impliziten Verfahren vereinen. Die Auswirkung dieser spezifischen Eigenheiten auf Ensemble-Vorhersagen könnte dazu beitragen, die praktische Relevanz solcher Überlegungen weiter zu bestimmen.

Wie gezeigt wurde, finden nicht alle Eigenschaften von Hamilton-Systemen ihre Entsprechung in der Nambu-Darstellung. Dies gilt insbesondere für die algebraische und die geometrische Interpretation. Damit kann die Nambu-Mechanik aus prinzipiellen Gründen nicht als ‚einfache‘ Verallgemeinerung der Hamilton-Mechanik bezeichnet werden. Eine enge Verbindung zwischen Takhtajan- und Jacobi-Identität wurde von Salmon (2005) vorgeschlagen. Gleichzeitig gibt es aber Hinweise, dass die Takhtajan-Identität der barotropen Vorticitygleichung gilt (Névir und Sommer, 2009), obschon eine Kontraktion davon ein System ohne Jacobi-Identität ergibt (Benjamin, 1984). Diese Diskussion kann also fortgeführt werden und zeigt, dass die Nambu-Darstellung allgemeiner ist als der bekannte, zweifach antisymmetrische Tensor der Strukturkonstanten (Bialynicki-Birula und Morrison, 1991). Die Berücksichtigung der Takhtajan-Identität ergibt eine zusätzliche Nebenbedingung an Nambu-Systeme, die möglicherweise mit weiteren algebraischen Eigenschaften der Fluidodynamik verbunden ist. Eine Anwendung davon, die eine aktuelle Diskussion (Dubinkina und Frank, 2009; Abramov und Majda, 2003) aufgreift, könnte die statistische Untersuchung von barotroper Vorticitydynamik oder Flachwassermodellen mit Erhaltungsgesetzen für höhere PV-Momente sein.

Der Diskurs über die Erhaltungseigenschaften sowie die geometrische und algebraische Interpretation der Fluidodynamik und insbesondere der Atmosphärendynamik lässt sich auch losgelöst von der Nambu-Form im Rahmen der Casimire von (Lie-) Poisson-Systemen führen. Allerdings stellt die Nambu-Mechanik einen bildlichen Formalismus bereit, der speziell für die Wirbel-Erhaltungsgrößen der Atmosphärendynamik interessant ist. Die abstrakten Eigenschaften des Poisson-Tensors, insbesondere seine Dege-

neriertheit sowie die Abhängigkeit von den Phasenraumvariablen werden dabei durch Größen wie die (potentielle) Enstrophie oder die Helizität mit anschaulicher physikalischer Bedeutung ausgedrückt. Wie gezeigt wurde, bietet damit die Nambu-Darstellung auch für die Simulation von meteorologischen Modellsystemen einen interessanten Rahmen.

Teil III
Anhänge

Anhang A

Hamiltonsche Mechanik

In diesem Anhang werden diejenigen Aspekte der Hamiltonschen Mechanik aufgeführt, die für den Hauptteil der Arbeit benötigt werden. Eine umfassendere Diskussion findet sich in vielen Büchern der allgemeinen Mechanik, z. B. in Marsden (1999) oder Arnold (1989). Hier ist M stets eine endlichdimensionale Mannigfaltigkeit. Mit gewissen Einschränkungen (Marsden, 1999) lassen sich die Aussagen auch auf unendlichdimensionale Phasenräume, wie sie bei partiellen Differentialgleichungen auftreten, übertragen.

Üblicherweise werden Hamiltonsche Systeme über die Hamiltonschen Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{q} &= -\partial_p H \\ \dot{p} &= \partial_q H\end{aligned}\tag{A.1}$$

definiert. Damit ist bereits eine spezielle Wahl von Variablen (die kanonischen Variablen) vorweggenommen. Die Hamilton-Mechanik kann jedoch auch koordinatenunabhängig¹ formuliert werden. Insofern sind die Hamiltonschen Differentialgleichungen die Komponenten-Schreibweise eines allgemeinen, geometrischen Sachverhaltes: Der Fluss ϕ^t des Systems auf M ist der Fluss eines Hamiltonschen Vektorfeldes \mathbf{X}_H :

$$\frac{d}{dt}\phi^t(z) = \mathbf{X}_H(\phi^t(z)).\tag{A.2}$$

Generell können Hamiltonsche Systeme in zwei Klassen eingeteilt werden:

- Hamilton-Systeme auf symplektischen Mannigfaltigkeiten, z. B. die Dynamik von Massepunkten.
- Hamilton-Systeme auf Poisson-Mannigfaltigkeiten, z. B. Systeme, die aus einer Reduktion des Phasenraumes hervorgehen.

Genauer gesagt sind erstere ein Spezialfall der letzteren (Abb. A.1). Symplektische Systeme werden auch ‚regulär‘ oder ‚nicht-ausgeartet‘ genannt. Poisson-Systeme, die nicht symplektisch sind werden auch ‚singulär‘ oder ‚ausgeartet‘ genannt.

Ferner können zwei Darstellungen unterschieden werden:

¹gemeint sind die Koordinaten des Phasenraumes

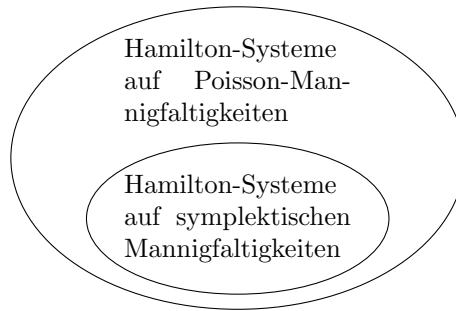


Abbildung A.1: Hamilton-Systeme

- Die geometrische Darstellung durch die Hamilton-Funktion und die symplektische 2-Form.
- Die algebraische Darstellung durch die Hamilton-Funktion und die Poisson-Klammern oder den Poisson-Tensor.

Reguläre Systeme können dabei in beiden Darstellungen geschrieben werden, singuläre hingegen nur in der zweiten, algebraischen.

A.1 Systeme auf symplektischen Mannigfaltigkeiten

Hamiltonsche Systeme auf symplektischen Mannigfaltigkeiten entsprechen dem üblicherweise betrachteten, regulären Fall. Die Newtonsche Mechanik findet darin eine anschauliche, geometrische Formulierung.

Definition.

- Eine **symplektische Mannigfaltigkeit** ist eine Mannigfaltigkeit M mit einer darauf definierten nicht-entarteten, geschlossenen 2-Form ω .
- Ein **Hamiltonsches Vektorfeld** \mathbf{X}_H auf einer symplektischen Mannigfaltigkeit ist ein Vektorfeld, für das eine Funktion $H \in C^\infty(M)$ existiert, so dass

$$dH = i_{\mathbf{X}_H}\omega.$$

Ein Hamiltonsches System ist dann die Differentialgleichung (A.2) zum Vektorfeld \mathbf{X}_H . Aus der Antisymmetrie der symplektischen Zwei-Form folgt die Energieerhaltung entlang \mathbf{X}_H (also unter dem Fluss ϕ):

$$\mathcal{L}_{\mathbf{X}_H}H = dH(\mathbf{X}_H) = \omega(\mathbf{X}_H, \mathbf{X}_H) = 0.$$

\mathcal{L} bezeichnet hier die Lie-Ableitung.

Definition (Kanonische Koordinaten). *Die Koordinaten*

$$(z^1, \dots, z^{2n}) = (q^1, \dots, q^n, p^1, \dots, p^n)$$

auf M heißen kanonisch, falls

$$\omega = \sum_{i=1}^n dz^i \wedge dz^{i+n} = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp^i.$$

Gemäß dem Darboux-Theorem gibt es auf jeder symplektischen Mannigfaltigkeit einen Atlas aus kanonischen Koordinaten.

In kanonischen Koordinaten nimmt die Differentialgleichung (A.2) die übliche Form (A.1) (bzw. die n -dimensionale Verallgemeinerung davon) der Hamiltonschen Differentialgleichungen an.

Definition (Liouville-Volumenform). *Sei (M, ω) eine $2n$ -dimensionale symplektische Mannigfaltigkeit. Dann ist die Liouville-Volumenform durch*

$$\Omega := \frac{(-1)^{n(n-1)/2}}{n!} \underbrace{\omega \wedge \dots \wedge \omega}_{n\text{-mal}}$$

definiert.

Aus dem Darboux-Theorem folgt, dass alle symplektischen Mannigfaltigkeiten von gerader Dimension sind und durch die Liouville-Volumenform Ω orientiert werden.

Theorem (Liouvillesches Theorem). *Hamiltonsche Vektorfelder auf symplektischen Mannigfaltigkeiten sind divergenzfrei bezüglich der Liouville-Volumenform.*

Dies folgt aus der Hamiltonschen Darstellung von \mathbf{X}_H . Tatsächlich sind sogar beliebige Potenzen $\bigwedge_{i=1}^k \omega$ der symplektischen 2-Form, die Poincaré-Cartan-Invarianten, unter dem Fluss erhalten. Volumenerhaltende Flüsse werden auch symplektische oder kanonische Flüsse genannt, dazu gehören alle Hamiltonschen Flüsse.

A.2 Systeme auf Poisson-Mannigfaltigkeiten

Poisson-Mannigfaltigkeiten sind eine Verallgemeinerung der symplektischen Mannigfaltigkeiten: Jede symplektische Mannigfaltigkeit ist auch Poisson aber nicht umgekehrt.

Definition.

- Eine Poisson-Mannigfaltigkeit $(M, \{\cdot, \cdot\})$ ist eine Mannigfaltigkeit M mit einer Poissonklammer. Diese ist definiert als eine bilineare, antisymmetrische Abbildung

$$\{\cdot, \cdot\} : \mathcal{C}^\infty(M) \times \mathcal{C}^\infty(M) \rightarrow \mathcal{C}^\infty(M),$$

welche für alle $F, G, H \in \mathcal{C}^\infty$ der Leibnizidentität

$$\{FG, H\} = \{F, H\}G + F\{G, H\}$$

und der Jacobi-Identität

$$\{\{F, G\}, H\} + \{H, F\}, G\} + \{G, H\}, F\} = 0$$

genügt.

- Eine Hamiltonsche Vektorfeld \mathbf{X}_H auf einer Poisson-Mannigfaltigkeit ist ein Vektorfeld, für das eine Funktion $H \in \mathcal{C}^\infty(M)$ existiert, so dass

$$\mathbf{X}_H(\cdot) = \{\cdot, H\}.$$

Die Hamiltonschen Differentialgleichungen ergeben sich dann durch Einsetzen der Flussabbildung in die Poisson-Klammer:

$$\frac{d}{dt}\phi^t(z) = \mathbf{X}_H(\phi^t(z)) = \{\phi^t(z), H\}.$$

Die H -Erhaltung folgt aus der Antisymmetrie der Klammer. Jacobi- und Leibnizidentität sind ein Ausdruck dafür, dass sowohl das Klammerprodukt als auch das Produkt zwischen Funktionen der Produktregel genügen, vgl. Tab. A.1.

Jacobi-Identität $\{\{F, G\}, H\} = \{\{F, H\}, G\} + \{F, \{G, H\}\}$	Leibnizidentität $\{FG, H\} = \{F, H\}G + F\{G, H\}$
$F \rightarrow \{F, \cdot\}$ ist Derivation bzgl. Produkt $\{\cdot, \cdot\}$	$F \rightarrow \{F, \cdot\}$ ist Derivation bzgl. Produkt \cdot

Tabelle A.1: Jacobi- und Leibnizidentität

Jede Poisson-Klammer kann wegen der Linearität und der Produktregel durch einen Tensor und Gradienten ausgedrückt werden:

Definition (Poisson-Tensor oder kosymplektischer Tensor). Für eine gegebene Poisson-Mannigfaltigkeit ist der Poisson-Tensor B (ein Bivektor) durch

$$\{F, G\} = B(dF \otimes dG)$$

definiert.

Die Komponentendarstellung des Poisson-Tensors ist bei praktischen Anwendungen hilfreich. In Komponenten des Poisson-Tensors schreibt sich die Jacobi-Identität als

$$B^{ki} B_{,k}^{jl} + B^{kl} B_{,k}^{ij} + B^{kj} B_{,k}^{li} = 0,$$

und die Bewegungsgleichungen als

$$\frac{d}{dt}z^i = B^{ij}H_{,j}.$$

Als Matrix aufgefasst, gilt für den Poisson-Tensor

$$(M, \{\cdot, \cdot\}) \text{ ist regulär} \Leftrightarrow \det(B) \neq 0.$$

Im regulären Fall ergibt sich aus der Inversen des Poisson-Tensors die Matrix der symplektischen 2-Form. Im singulären Fall ist hingegen B als Matrix nicht invertierbar und es gibt einen Eigenvektor ∇C im Kern der Matrix B :

$$B^{\mu\nu}C_{,\mu} = 0.$$

für die Poisson-Klammer bedeutet dies

$$\{C, F\} = 0 \quad \forall F.$$

Die erzeugende Funktion C wird Casimirfunktion genannt. Sie ist invariant unter dem Fluss jedes beliebigen Hamiltonschen Vektorfeldes auf M . Die Isoflächen von C sind also invariante Unter-Mannigfaltigkeiten. Für den Eulerschen Kreisel sind das die Ellipsoide mit konstantem Drehimpulsbetrag. Auf ihnen ist die Dynamik wieder regulär, allerdings existiert in den meisten Fällen keine explizite Parametrisierung dieser so genannten symplektischen Blätter.

Beispiel (Lorenz'63-System (Névir und Blender, 1993)). *Auf dem Phasenraum \mathbb{R}^3 ist das konservative Lorenzsystem*

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \sigma y \\ \dot{y} &= rx - xz \\ \dot{z} &= xy\end{aligned}$$

definiert. Die Lösungen sind der Fluss zum Hamiltonschen Vektorfeld

$$\mathbf{X}_H = \begin{pmatrix} \sigma y \\ rx - xz \\ xy \end{pmatrix}, \quad H = \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2}z^2 - rz,$$

wobei der Poisson-Tensor B in Koordinaten (x, y, z) durch

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^T \begin{pmatrix} 0 & \sigma & 0 \\ -\sigma & 0 & -x \\ 0 & x & 0 \end{pmatrix} \mathbf{v}$$

gegeben ist. Der Kern des Poisson-Tensors wird aus dem Gradienten des Casimirs $C = \frac{1}{2}x^2 - \sigma z$ gebildet. Diese Hamilton-Darstellung lässt sich auch als Nambu-Klammer schreiben (Névir und Blender, 1993).

Während die Darstellung von Hamiltonschen Systemen mit der symplektischen 2-Form geometrischer Natur ist, betont die Poisson-Klammer mehr die algebraischen Aspekte. Aufgrund ihrer Definition bildet die Poisson-Klammer mit den Funktionen auf M eine Lie-Algebra. Diese algebraische Struktur kann auch auf die Vektorfelder übertragen werden: Die Poissonklammer auf $\mathcal{C}^\infty(M)$ definiert über

$$[\mathbf{X}_F, \mathbf{X}_H] := \mathbf{X}_F \circ \mathbf{X}_H - \mathbf{X}_H \circ \mathbf{X}_F = -\mathbf{X}_{\{F, H\}} \quad (\text{A.3})$$

eine Lie-Algebra auf den Hamiltonschen Vektorfeldern von M . Die zweite Gleichheit folgt dabei alleine aus der Jacobi-Identität der Poissonklammer und diese geht somit auf den Kommutator der Hamiltonschen Vektorfelder über. Die Hamiltonschen Vektorfelder sind bzgl. des oben definierten Kommutators sogar eine Unter-Lie-Algebra aller Vektorfelder. Abbildung (A.3) ist also ein Lie-Algebra-Antihomomorphismus zwischen den Hamiltonschen Vektorfeldern und den Funktionen auf M .

Sowohl die Lie-Algebra der Funktionen auf M als auch diejenige der Vektorfelder auf dem Tangentialbündel TM sind unendlichdimensional, bedürfen also zur Definition einer unendlichen Menge von Strukturkonstanten. Allerdings wird die Poisson-Klammer stets über partielle Ableitungen definiert, die Klammer für nichtlineare Funktionen ergibt sich dann aus der Produktregel für die partiellen Ableitungen, womit auch automatisch die Leibniz-Identität erfüllt ist. Die algebraische Struktur wird demnach durch Angabe der Klammern linearer Funktionen (oder entsprechend dem Poisson-Tensor mit endlich vielen Einträgen) vollständig festgelegt.

A.2.1 Zusammenhang zwischen algebraischer und geometrischer Darstellung

Ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) gegeben, dann wird durch

$$\{F, H\} := \omega(\mathbf{X}_F, \mathbf{X}_H)$$

eine Poisson-Klammer auf $\mathcal{C}^\infty(M)$ definiert. In Koordinaten gilt:

$$\{z^\mu, z^\nu\} = \omega^{\mu\nu}.$$

Ist umgekehrt eine nicht-ausgeartete Poisson-Klammer gegeben, so definiert

$$\omega_{\mu\nu} := (B^{\mu\nu})^{-1}$$

eine symplektische 2-Form auf M . Die Geschlossenheit von ω folgt dabei aus der Jacobi-Identität der Klammer und umgekehrt.

A.2.2 Lie-Poisson-Mannigfaltigkeiten

Ein spezielles Beispiel einer Poisson-Klammer ist die Lie-Poisson-Klammer:

Definition (Lie-Poisson-Klammer). Sei G eine Lie-Gruppe mit zugehöriger Lie-Algebra \mathfrak{g} und der dazu dualen \mathfrak{g}^* . Dann ist die Lie-Poisson-Klammer auf $\mathcal{F}(\mathfrak{g}^*)$ definiert durch

$$\{F, G\}_{\pm}(\mu) = \pm \left\langle \mu, \left[\frac{\delta F}{\delta \mu}, \frac{\delta G}{\delta \mu} \right] \right\rangle, \quad \mu \in \mathfrak{g}^*, \quad F, G \in \mathcal{F}(\mathfrak{g}^*).$$

Hier gilt für die Funktionalableitungen $\frac{\delta F}{\delta \mu}, \frac{\delta G}{\delta \mu} \in \mathfrak{g}$. $\langle \cdot, \cdot \rangle$ bezeichnet die Paarung der Algebra mit ihrem Dualraum und $[\cdot, \cdot]$ den Kommutator auf \mathfrak{g} . Für lineare Funktionen F, G ist die Klammer $\{F, G\}$ offensichtlich auch linear.

Die Lie-Poisson-Klammer kann auch in Komponenten dargestellt werden. Sei $\{\xi_a\}$ eine Basis von \mathfrak{g} und $\{\xi^a\}$ die dazu duale Basis von \mathfrak{g}^* . Ferner seien die Strukturkonstanten wie folgt definiert:

$$[\xi_a, \xi_b] = \Gamma_{ab}^d \xi_d.$$

Mit der Koordinatendarstellung $\mu = \mu_a \xi^a$ gilt dann

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta \mu} &= \frac{\partial F}{\partial \mu_a} e_a \in \mathfrak{g} \\ \Rightarrow \left[\frac{\delta F}{\delta \mu}, \frac{\delta G}{\delta \mu} \right] &= \frac{\partial F}{\partial \mu_a} \frac{\partial G}{\partial \mu_b} [e_a, e_b] = \frac{\partial F}{\partial \mu_a} \frac{\partial G}{\partial \mu_b} \Gamma_{ab}^d e_d \\ \Rightarrow \{F, G\}_{\pm} &= \pm \left\langle \mu_d e^d, \frac{\partial F}{\partial \mu_a} \frac{\partial G}{\partial \mu_b} \Gamma_{ab}^d e_d \right\rangle = \pm \mu_d \frac{\partial F}{\partial \mu_a} \frac{\partial G}{\partial \mu_b} \Gamma_{ab}^d. \end{aligned}$$

Die Eigenschaften der Lie-Poisson-Klammer folgen damit direkt aus den Eigenschaften der Lie-Algebra \mathfrak{g} . Die linearen Funktionen bilden auf $\mathcal{C}^\infty(\mathfrak{g}^*)$ eine Unter-Lie-Algebra mit den Strukturkonstanten von \mathfrak{g} :

$$\{\mu_a, \mu_b\}_{\pm} = \pm \Gamma_{ab}^d \mu_d.$$

Die Bewegungsgleichungen zum Hamiltonian H lauten in Koordinaten

$$\dot{\mu} = \mp \mu_d \Gamma_{ab}^d \frac{\partial H}{\partial \mu_b}.$$

Die Lie-Poisson-Klammer ist ein wichtiges Beispiel einer singulären Klammer. Sie ist das Resultat der sogenannten Lie-Poisson-Reduktion (Marsden, 1999): Ist die kanonische Klammer auf dem Kotangentialbündel einer Gruppe gegeben, so wird durch die Lie-Poisson-Klammer $\mathcal{C}^\infty(\mathfrak{g}^*)$ zu einer Poisson-Mannigfaltigkeit und die Identifizierung zwischen den Funktionen auf \mathfrak{g}^* und den unter G links- bzw. rechtsinvarianten Funktionen auf T^*G ist ein Lie-Algebra-Isomorphismus (Tab. A.2).

Ein anschauliches Beispiel einer solchen Reduktion ist der starre Körper: Sein Konfigurationsraum ist die Gruppe der Drehungen $SO(3)$, die durch die Eulerschen Winkel parametrisiert ist. Der Impulsphasenraum ist das Kotangentialbündel $T^*SO(3)$. Dieses umfasst als Fußpunkte die Eulerschen Winkel sowie die dazugehörigen konjugierten Drehimpulse. Das System und insbesondere die kinetische Energie ist invariant unter Rotationen und entsprechend ergibt sich aus der Reduktion die Lie-Poisson-Klammer

	Kanonische Poisson-Klammer $\{\cdot, \cdot\} : \mathcal{C}^\infty(M) \times \mathcal{C}^\infty(M) \rightarrow \mathcal{C}^\infty(M)$	Lie-Poisson-Klammer $\{\cdot, \cdot\}_\pm : \mathcal{C}^\infty(\mathfrak{g}^*) \times \mathcal{C}^\infty(\mathfrak{g}^*) \rightarrow \mathcal{C}^\infty(\mathfrak{g}^*)$
Poisson-Mannigfaltigkeit	$M = T^*G$	$\mathfrak{g}^* = T_e^*G$
Lie-Algebra	$\mathcal{C}^\infty(M)$	$\mathcal{C}^\infty(\mathfrak{g}^*) \supset \mathfrak{h}_{\text{lin}} = GL(\mathfrak{g}^*)$ Strukturkonstanten von $\mathfrak{h}_{\text{lin}}$ = Strukturkonstanten von \mathfrak{g}
Bsp. Kreisel	$M = T^*SO(3)$	$\mathfrak{g}^* = T_e^*SO(3) = \mathfrak{so}(3)^*$
Bsp. Inkomp. Fluidodynamik	$M = T^*SDiff$	$\mathfrak{g}^* = T_e^*SDiff = sVect^*$

Tabelle A.2: Lie-Poisson-Reduktion

auf der Drehimpulsalgebra $\mathfrak{so}(3)^*$. Dieser reduzierte Phasenraum entspricht einer Beschreibung, die nur noch die Drehimpulse, nicht jedoch die Winkel selber umfasst. Die Komponenten der Bewegungsgleichungen sind dann gerade die Eulerschen Kreiselgleichungen. Da die Rotationen eine kompakte Gruppe bilden, ergibt sich aus Abschnitt 9.2 die Existenz einer Nambu-Darstellung mit dem Absolutbetrag des Drehimpulses als konstituierende Größe neben der kinetischen Energie.

Auch für die inkompressible Fluidodynamik lässt sich eine Lie-Poisson-Reduktion durchführen (Ebin und Marsden, 1970; Marsden und Weinstein, 1974; Vasylykevych und Marsden, 2005). Für ein inkompressibles Fluid ist der Konfigurationsraum durch die Gruppe $G = SDiff(A)$ der divergenzfreien Diffeomorphismen auf dem Strömungsgebiet A gegeben. Der symplektische Impulsphasenraum ist dann wieder das Kotangentenbündel $T^*SDiff(A)$. Aus der Teilchenumordnungssymmetrie ergibt sich, dass bei der Reduktion auf das Duale der Lie-Algebra der divergenzfreien Vektorfelder (bzw. der Stromfunktionen) $sVect^*$ (d. h. die Vorticity), die Bewegungsgleichungen aus der Lie-Poisson-Klammer gerade die Eulerschen Gleichungen für das Fluid sind. Der reduzierte Phasenraum beschreibt dabei nur noch die räumliche Verteilung der Variablen, nicht jedoch den individuellen Ort jedes Teilchens.

Anhang B

Lie-Algebren und Funktionalableitungen

In diesem Anhang werden sehr kurz einige im Haupttext verwendete Definitionen, Eigenschaften und Zusammenhänge aufgeführt. Eine ausführlichere Darstellung findet sich in beliebigen Büchern über Lie-Algebren (z. B. Jacobson (1962); Ma (2008); Arnold und Khesin (1998)) bzw. mathematische Methoden der Physik (z. B. Giaquinta und Hildebrandt (1996); Arnold (1989); Olver (1990)).

B.1 Lie-Algebren

Anschaulich gesprochen beschreiben Lie-Algebren die lokale Struktur einer Lie-Gruppe in der Nähe der Identität.

Definition (Lie-Algebra). *Eine Lie-Algebra $(\mathfrak{g}, [\cdot, \cdot])$ ist ein Vektorraum \mathfrak{g} mit einer bilinearen Abbildung $[\cdot, \cdot] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ (Lie-Klammer genannt), so dass*

- $[x, x] = 0 \quad \forall x \in \mathfrak{g}$
- $[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0 \quad \forall x, y, z \in \mathfrak{g}$ (Jacobi-Identität)

In den hier betrachteten Fällen ist der erste Punkt äquivalent mit der Antisymmetrie der Klammer.

Die Struktur einer Lie-Algebra wird in Koordinaten durch die Strukturkonstanten ausgedrückt. Bezüglich einer Basis ξ_a der Lie-Algebra \mathfrak{g} sind diese wie folgt definiert:

$$[\xi_a, \xi_b] = \Gamma_{ab}^d \xi_d. \quad (\text{B.1})$$

Bisweilen wird die Basis auch mit oberen Indizes versehen und die Strukturkonstanten entsprechen als Γ_d^{ab} geschrieben, was für die Resultate unerheblich ist. Eine wichtige, invariante Größe einer Lie-Algebra ist die Killing-Form.

Definition (Killing-Form). Sei \mathfrak{g} eine endlichdimensionale Lie-Algebra über \mathbb{R} . Dann ist die bilineare Killing-Form folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} K_{\mathfrak{g}} : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} &\rightarrow \mathbb{R} \\ (X, Y) &\mapsto B_{\mathfrak{g}}(X, Y) := \text{tr}(\text{ad}_X \circ \text{ad}_Y). \end{aligned}$$

Die adjungierte Abbildung ist dabei wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} \text{ad} : \mathfrak{g} &\rightarrow \text{End}(\mathfrak{g}) \\ X &\mapsto \text{ad}_X : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g} \\ Y &\mapsto \text{ad}_X(Y) := [X, Y]. \end{aligned}$$

Sind Γ_{jk}^i die Strukturkonstanten der Algebra, so ergeben sich die Komponenten der Killing-Form aus

$$K_{ij} = \Gamma_{ik}^l \Gamma_{jl}^k.$$

Über die Cartan-Kriterien wird ein Zusammenhang zwischen der Killing-Form und der Struktur der Lie-Algebra hergestellt. Demnach ist die Killing-Form genau dann regulär (und damit eine Metrik), wenn die Lie-Algebra halbeinfach ist. Halbeinfache Lie-Algebren bilden anschaulich gesprochen Grundbausteine der Algebra, da gemäß der Levi-Zerlegung jede endlichdimensionale reelle Lie-Algebra als semidirektes Produkt einer lösbaren und einer halbeinfachen Lie-Algebra geschrieben werden kann.

B.2 Funktionalableitungen

Die Funktionalableitung (auch ‚Variationsableitung‘ genannt) ist die Verallgemeinerung der partiellen Ableitung auf Räume unendlicher Dimension, hier ein Raum ausreichend differenzierbarer Funktionen.

Definition (Funktionalableitung). Die Funktionalableitung des Funktionals \mathcal{F} ist durch

$$\mathcal{F}[\zeta + h] - \mathcal{F}[\zeta] = \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}, h \right\rangle + \mathcal{O}(\|h\|^2)$$

definiert, wobei $\langle \cdot, \cdot \rangle$ die Paarung auf dem Funktionenraum und h eine beliebige Testfunktion ist.

Funktionale in der zweidimensionalen Fluidodynamik haben typischerweise die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{F} : \mathcal{C}^\infty(A) &\rightarrow \mathbb{R} \\ \zeta &\mapsto \mathcal{F}[\zeta] := \int dA f(\zeta), \end{aligned} \tag{B.2}$$

und die Paarung ist durch das L^2 -Skalarprodukt gegeben. Dafür ergibt sich

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} = \frac{\partial f}{\partial \zeta}. \tag{B.3}$$

Falls der Integrand in (B.2) nicht-lokal ist, wird die Funktionalableitung aus partiellen Integrationen berechnet, wobei Randbedingungen eingehen.

B.2.1 Diskretisierung der Funktionalableitung

Sei

$$\hat{\zeta} = (\zeta_1, \dots, \zeta_N)$$

eine Diskretisierung der Funktion ζ auf einem horizontalen Gitter mit Gitterzellen der Fläche A_i und sei

$$F(\hat{\zeta}) = \sum_i A_i f(\zeta_i)$$

eine Diskretisierung des oben angegebenen Funktionals \mathcal{F} . Dann wird die Funktionalableitung $\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta}$ approximiert durch

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \zeta} \rightarrow \frac{1}{A_i} \frac{\partial F}{\partial \zeta_i}.$$

Die Approximation von integralen Größen wie zum Beispiel der Enstrophie wird damit unabhängig vom Volumenelement:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \zeta} &= \frac{\delta}{\delta \zeta} \frac{1}{2} \int dA \zeta^2 = \zeta \\ \Rightarrow \frac{1}{A_i} \frac{\partial E}{\partial \zeta_i} &= \zeta_i. \end{aligned}$$

Dies gilt hingegen nicht für lokale Größen:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \zeta(x)}{\delta \zeta(y)} &= \zeta \delta(x - y) \\ \Rightarrow \frac{1}{A_i} \frac{\partial \zeta_i}{\partial \zeta_{i'}} &= \frac{1}{A_i} \zeta_i \delta_{i, i'}. \end{aligned}$$

Diese Form der Diskretisierung kann auch auf versetzten Gittern angewendet werden. Die Variable, die sich aus der Ableitung einer globalen Größe ergibt, ist dabei stets an derselben Stelle, wie die Größe, nach der abgeleitet wird, definiert.

B.2.2 Kettenregel für Funktionalableitungen

Die Kettenregel für Funktionalableitungen ergibt sich als Verallgemeinerung der Kettenregel für die gewöhnliche Ableitung, wobei die Summe über die Variablen durch ein Integral ersetzt wird. Unter der Transformation von Geschwindigkeitsvariablen auf die abgeleiteten Größen Vorticity und Divergenz

$$\mathbf{v} \rightarrow \begin{pmatrix} \zeta \\ \mu \end{pmatrix}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta \mathbf{v}} &= \int dA \left(\frac{\delta \zeta}{\delta \mathbf{v}} \frac{\delta}{\delta \zeta} + \frac{\delta \mu}{\delta \mathbf{v}} \frac{\delta}{\delta \mu} \right) \\
 &= \int dA \left(\frac{\delta \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{v}}{\delta \mathbf{v}} \frac{\delta}{\delta \zeta} + \frac{\delta \nabla \cdot \mathbf{k}}{\delta \mathbf{v}} \frac{\delta}{\delta \mu} \right) \\
 &= \frac{\delta}{\delta \mathbf{v}} \int dA \left(\mathbf{k} \cdot \text{rot} \left(\mathbf{v} \frac{\delta}{\delta \zeta} \right) + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \times \nabla \frac{\delta}{\delta \zeta} + \text{div} \left(\mathbf{v} \frac{\delta}{\delta \mu} \right) - \mathbf{v} \cdot \nabla \frac{\delta}{\delta \mu} \right) \\
 &= -\mathbf{k} \times \nabla \frac{\delta}{\delta \zeta} - \nabla \frac{\delta}{\delta \mu}.
 \end{aligned}$$

Hier sind die Sätze von Gauß und Stokes sowie geeignete Randbedingungen eingegangen.

Anhang C

Helmholtz-Theorem und Potentialrekonstruktion

Das Helmholtz-Theorem existiert in verschiedenen Formen und wird besonders in Anwendungen der Fluid- und Elektrodynamik verwendet. Neben einer sehr allgemeinen Formulierung (der Hodge-Zerlegung) ist hier speziell die zwei- und dreidimensionale Version interessant. Die allgemeine Aussage ist, dass unter geeigneten Voraussetzungen ein Vektorfeld in einen divergenzfreien und einen rotationsfreien Anteil zerlegt werden kann.

C.1 Das zweidimensionale Helmholtz-Theorem

Sei \mathbf{v} ein stetig differenzierbares Vektorfeld auf einem zweidimensionalen Gebiet mit geeigneten Randbedingungen (z. B. periodisch auf beschränkten Gebieten, genügend rasch abfallend gegen Unendlich auf unbeschränkten Gebieten). Dann garantiert das Helmholtz-Theorem die Existenz einer Stromfunktion χ und eines Geschwindigkeitspotentials γ :

$$\mathbf{v} = \underbrace{\mathbf{k} \times \nabla \chi}_{=: \mathbf{v}^\chi} + \underbrace{\nabla \gamma}_{=: \mathbf{v}^\gamma}.$$

Damit wird das Vektorfeld in einen solenoidalen (divergenzfreien) Anteil \mathbf{v}^χ und einen irrotationalen (rotationsfreien) Anteil \mathbf{v}^γ aufgespalten.

Die Zerlegung braucht jedoch nicht immer eindeutig zu sein: Sei η eine beliebige harmonische Funktion und ξ ihr harmonisch konjugiertes (d. h. $f = \eta + i\xi$ ist analytisch in der komplexen Variable $z = x + iy$). Dann erfüllen η und ξ die Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen

$$\mathbf{k} \times \nabla \eta + \nabla \xi = 0.$$

Daraus folgt nun aber die Invarianz des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{v} unter der Transformation $(\chi, \gamma) \rightarrow (\chi', \gamma') = (\chi + \eta, \gamma + \xi)$:

$$\mathbf{v}' = \mathbf{k} \times \nabla \chi' + \nabla \gamma' = \mathbf{k} \times \nabla \chi + \nabla \gamma = \mathbf{v}.$$

Das heißt, χ' und γ' konstituieren genau dasselbe Vektorfeld wie χ und γ . Um die Eindeutigkeit der Potentiale zu gewährleisten, müssen entsprechende Randbedingungen spezifiziert werden. Unter obiger Transformation

$$(\chi, \gamma) \mapsto (\chi', \gamma') = (\chi + \eta, \gamma + \xi) \quad \text{mit } \mathbf{k} \times \nabla \eta + \nabla \xi = 0$$

gilt für den solenoidalen Anteil des Vektorfeldes

$$\mathbf{v}^{\chi'} = \text{rot } \mathbf{k} \chi' = \underbrace{\text{rot } \mathbf{k} \chi}_{=:\mathbf{v}^{\chi}} + \underbrace{\text{rot } \mathbf{k} \eta}_{=:\mathbf{v}^L},$$

wobei \mathbf{v}^L ein Laplacesches, also ein gleichzeitig solenoidales und irrotationales Vektorfeld ist:

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{v}^L &= \text{div } \text{rot } \mathbf{k} \eta = 0 \\ \text{rot } \mathbf{v}^L &= \text{rot } \text{rot } \mathbf{k} \eta = -\text{rot } \text{grad } \xi = 0. \end{aligned}$$

Analog gilt für die irrotationale Komponente

$$\mathbf{v}^{\gamma'} = \text{grad } \gamma' = \nabla \gamma + \nabla \xi = \nabla \gamma - \text{rot } \mathbf{v}^L = \mathbf{v}^{\gamma} - \mathbf{v}^L.$$

Zusammengefasst gilt also für die Transformation der Helmholtz-Aufspaltung

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{\chi} &\mapsto \mathbf{v}^{\chi'} = \mathbf{v}^{\chi} + \mathbf{v}^L \\ \mathbf{v}^{\gamma} &\mapsto \mathbf{v}^{\gamma'} = \mathbf{v}^{\gamma} - \mathbf{v}^L. \end{aligned}$$

Die Eichfreiheit der Potentiale wird demnach durch die Laplaceschen Vektorfelder vermittelt. Auf der Sphäre ist nur das triviale Feld $\mathbf{v} = 0$ Laplacesch, deswegen liefert das Helmholtz-Theorem hier eine eindeutige Aufspaltung in einen solenoidalen und einen irrotationalen Anteil des Vektorfeldes.

C.1.1 Zusammenhang mit der Kettenregel der Funktionalableitung

Die oben eingeführte Helmholtz-Zerlegung kann benutzt werden, um die Funktionalableitung der kinetischen Energie nach den abgeleiteten Größen zu berechnen. Aus der einfachen Form

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}} = \mathbf{v} = \mathbf{k} \times \nabla \chi + \nabla \gamma$$

und dem entsprechenden Ausdruck aus der Kettenregel für die Transformation zu abgeleiteten Größen (Abschnitt B.2)

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{v}} = -\mathbf{k} \times \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} - \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu}$$

ergeben sich durch Vergleich der rechten Seiten die beiden skalaren Gleichungen

$$\mathbf{k} \cdot \text{rot} \begin{pmatrix} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \\ \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \end{pmatrix} = -\mathbf{k} \cdot \text{rot} \begin{pmatrix} \chi \\ \gamma \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$\text{div} \begin{pmatrix} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \\ \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \end{pmatrix} = -\text{div} \begin{pmatrix} \chi \\ \gamma \end{pmatrix}.$$

Eine Lösung davon ergibt die Funktionalableitungen der kinetischen Energie nach den abgeleiteten Variablen:

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} = -\chi$$

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} = -\gamma.$$

Seien nun η und ξ zwei harmonisch konjugierte Felder, d. h.

$$\mathbf{k} \times \nabla \eta + \nabla \xi = 0, \quad \text{oder äquivalent} \quad \mathbf{k} \cdot \text{rot} \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix} = 0, \quad \text{div} \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix} = 0.$$

Für die transformierten Potentiale $\begin{pmatrix} \chi' \\ \gamma' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi + \eta \\ \gamma + \xi \end{pmatrix}$ gelten dann die folgenden

Beziehungen:

$$\mathbf{k} \cdot \text{rot} \begin{pmatrix} \chi' \\ \gamma' \end{pmatrix} = \mathbf{k} \cdot \text{rot} \begin{pmatrix} \chi \\ \gamma \end{pmatrix} = -\mathbf{k} \cdot \text{rot} \begin{pmatrix} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \\ \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \end{pmatrix}$$

$$\text{div} \begin{pmatrix} \chi' \\ \gamma' \end{pmatrix} = \text{div} \begin{pmatrix} \chi \\ \gamma \end{pmatrix} = -\text{div} \begin{pmatrix} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \zeta} \\ \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mu} \end{pmatrix}.$$

Genau wie im divergenzfreien Fall die Funktionalableitung der kinetischen Energie nach der Vorticity nur bis auf eine beliebige globale Konstante mit der Stromfunktion übereinstimmt, gilt hier die Gleichheit nur bis auf zwei beliebige harmonisch konjugierte Felder η, ξ . Dies ist analog zur Tatsache, dass auch die Potentiale für ein vorgegebenes Geschwindigkeitsfeld jeweils nur bis auf genau diese Freiheiten definiert sind. Im konkreten Fall ist aber wegen der sphärischen Randbedingungen die Normierung vorgegeben.

C.2 Die Potentialrekonstruktion

In der Nambu-Darstellung der Flachwassergleichungen werden an Stelle der Geschwindigkeitspotentiale die Impulspotentiale χ und γ verwendet:

$$h\mathbf{v} = \mathbf{k} \times \nabla \chi + \nabla \gamma. \quad (\text{C.1})$$

Diese Potentiale müssen in jedem Zeitschritt aus den prognostischen Größen Vorticity, Divergenz und Höhe rekonstruiert werden, was einen beträchtlichen numerischen Aufwand bedeutet. Als Hilfsgrößen werden die Potentiale des Windfeldes eingeführt:

$$\mathbf{v} = \mathbf{k} \times \nabla \tilde{\chi} + \nabla \tilde{\gamma}. \quad (\text{C.2})$$

Die Rekonstruktion der Impuls-Potentiale aus gegebenen Vorticity- und einem gegebenen Divergenz-Feld geschieht in zwei Schritten über den Zwischenschritt des Geschwindigkeitsfeldes:

$$\boxed{\zeta, \mu} \xrightarrow{1.} \boxed{u, v} \xrightarrow{2.} \boxed{\chi, \gamma}$$

1. Um aus einem vorgegebenen Vorticity- und Divergenzfeld die Potentiale $\tilde{\chi}$ und $\tilde{\gamma}$ zu bestimmen, genügt es, die Poissongleichungen

$$\Delta \tilde{\chi} = \zeta, \quad \Delta \tilde{\gamma} = \mu \quad (\text{C.3})$$

zu lösen, z. B. durch Integration der entsprechenden Greenschen Funktion oder ein iteratives Verfahren. Das Windfeld ist dann durch (C.2) gegeben.

2. Die entsprechenden Poisson-Gleichungen für die Impulspotentiale lauten

$$\Delta \chi = \mathbf{k} \cdot \text{rot}(h\mathbf{v}) \quad (\text{C.4})$$

$$\Delta \gamma = \text{div}(h\mathbf{v}), \quad (\text{C.5})$$

wobei \mathbf{v} aus Schritt 1 gegeben ist.

Symbolverzeichnis

\mathbf{v}	Horizontaler, zweidimensionaler Geschwindigkeitsvektor
\mathbf{u}	Dreidimensionaler Geschwindigkeitsvektor
u	Zonalwindkomponente
v	Meridionalwindkomponente
w	Vertikalwindkomponente
h	Höhe
p	Druck
ζ	Vorticity
μ	Divergenz
Θ	Potentielle Temperatur
$\zeta_a = \zeta + f$	Absolute Vorticity
Ψ	Bernoulli-Funktion
f	Coriolisparameter
β	Meridionaler Gradient des Coriolisparameters
q	Potentielle Vorticity (PV)
\mathbf{k}	Vertikaler Einheitsvektor
χ	Stromfunktion
γ	Geschwindigkeitspotential
\mathbf{v}^χ	Geschwindigkeit zum solenoidalen Impuls
\mathbf{v}^γ	Geschwindigkeit zum irrotationalen Impuls
$J(\cdot, \cdot)$	Jacobi-Operator
ξ	Dreidimensionaler Wirbelvektor
\mathcal{H}	Energie bzw. Hamilton-Funktional
\mathcal{E}	(Potentielle) Enstrophie
\mathcal{F}	Beliebiges Funktional
\mathcal{C}	Casimir-Funktional
H	Hamilton-Funktion
F	Beliebige Funktion
C	Casimir-Funktion
Γ	Strukturkonstanten
$K(\cdot, \cdot)$	Killing-Form
B	Poisson-Tensor
N	Nambu-Tensor

ω	Symplektische 2-Form
ω_N	Nambu-3-Form
Ω	Volumenform
M	Diskrete Flussabbildung oder allg. Mannigfaltigkeit
\mathbf{X}	Vektorfeld im Phasenraum
\mathbf{X}_H	Hamiltonsches Vektorfeld
$\{\cdot, \cdot\}$	Poisson-Klammer
$\{\cdot, \cdot, \cdot\}$	Nambu-Klammer
$\mathcal{L}_{\mathbf{X}}$	Lie-Ableitung entlang \mathbf{X}
ρ	Massendichte oder Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
\mathbf{L}	Drehimpuls
δ_{ij}	Kronecker-Deltafunktion

Literaturverzeichnis

- [Abramov und Majda 2003] ABRAMOV, R. ; MAJDA, A. J.: Statistically relevant conserved quantities for truncated quasi-geostrophic flow. In: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 100 (2003), Nr. 7, S. 3841–3846
- [Arakawa und Lamb 1981] ARAKAWA, A. ; LAMB, V. R.: A Potential Enstrophy and Energy Conserving Scheme for the Shallow Water Equations. In: *Mon. Wea. Rev.* 109 (1981), S. 18–36
- [Arakawa 1966] ARAKAWA, Akio: Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion: Two-dimensional incompressible flow. Part I. In: *J. Comp. Phys.* 1 (1966), Nr. 1, S. 119–143
- [Arnold 1989] ARNOLD, V.I.: *Mathematical Methods of Classical Mechanics.* 2. New York : Springer-Verlag, 1989. – 516 S.
- [Arnold und Khesin 1998] ARNOLD, Vladimir I. ; KHESIN, Boris A.: *Applied Mathematical Sciences.* Bd. 125: *Topological Methods in Hydrodynamics.* Springer, 1998. – 374 S.
- [Benjamin 1984] BENJAMIN, T. B.: Impulse, Flow Force and Variational Principles. In: *IMA Journal of Applied Mathematics* 32 (1984), S. 3–68
- [Bialynicki-Birula und Morrison 1991] BIALYNICKI-BIRULA, Iwo ; MORRISON, P. J.: Quantum mechanics as a generalization of Nambu dynamics to the Weyl-Wigner formalism. In: *Physics Letters A* 158 (1991), Nr. 9, S. 453 – 457
- [Bihlo 2008] BIHLO, A: Rayleigh Bénard convection as a Nambu-metriplectic problem. In: *J. Phys. A: Mathematical and Theoretical* 41 (2008), Nr. 29
- [Bihlo und Staufer 2010] BIHLO, Alexander ; STAUFER, Johannes: Minimal atmospheric finite-mode models preserving symmetry and generalized Hamiltonian structures. In: *Physica D (eingereicht)* (2010)
- [Bjerknes 1904] BJERKNES, V.: Das Problem der Wettervorhersage, betrachtet vom Standpunkte der Mechanik und der Physik. In: *Meteor. Zeit.* 21 (1904), S. 1–7
- [Bokhove und Shepherd 1995] BOKHOVE, O. ; SHEPHERD, T.: On Hamiltonian Balanced Dynamics and the Slowest Invariant Manifold. In: *J. Atmos. Sci.* 53 (1995), S. 276–297

- [Bonaventura und Ringler 2005] BONAVENTURA, L. ; RINGLER, T.: Analysis of Discrete Shallow-Water Models on Geodesic Delaunay Grids with C-Type Staggering. In: *Mon. Wea. Rev.* 133 (2005), S. 2351–2371
- [Bonaventura et al. 2005] BONAVENTURA, Luca et al.: *The ICON shallow water model: scientific documentation and benchmark tests*. 2005. – Available at <http://icon.enes.org>
- [Bridges und Reich 2006] BRIDGES, Thomas J. ; REICH, Sebastian: Numerical methods for Hamiltonian PDEs. In: *J. Phys. A: Mathematical and General* 39 (2006), Nr. 19, S. 5287–5320
- [Charney et al. 1950] CHARNEY, J. G. ; FJORTOFT, R. ; NEUMANN, J. von: Numerical integration of the barotropic vorticity equation. In: *Tellus* 2 (1950), S. 237–254
- [Claussnitzer et al. 2008] CLAUSSNITZER, A. ; NÉVIR, P. ; LANGER, I. ; REIMER, E. ; CUBASCH, U.: Scale-dependent analyses of precipitation forecasts and cloud properties using the Dynamic State Index. In: *Meteorol. Zeitschrift* 17(6) (2008), S. 813–825
- [Clebsch 1857] CLEBSCH: Über eine allgemeine Transformation der hydrodynamischen Gleichungen. In: *J. Reine Angew. Math.* 54 (1857), S. 293–313
- [Davydov 1949] DAVYDOV, B.: A variational principle and the canonical equations for an ideal fluid. In: *Dolk. Akad. Nauk SSSR* 69 (1949), S. 165
- [Dubinkina und Frank 2007] DUBINKINA, Svetlana ; FRANK, Jason: Statistical mechanics of Arakawa’s discretizations. In: *J. Comp. Phys.* 227 (2007), Nr. 2, S. 1286–1305
- [Dubinkina und Frank 2009] DUBINKINA, Svetlana ; FRANK, Jason: Statistical relevance of vorticity conservation in the Hamiltonian particle-mesh method. In: *J. Comp. Phys.* Im Druck, akzeptiertes Manuskript (2009), S. –
- [Ebin und Marsden 1970] EBIN, D. G. ; MARSDEN, J. E.: Groups of diffeomorphisms and the motion of an incompressible fluid. In: *Ann. of Math.* 92 (1970), S. 102–163
- [Egger 1996] EGGER, Joseph: Volume Conservation in Phase Space: A Fresh Look at Numerical Integration Schemes. In: *Mon. Wea. Rev.* 124 (1996), S. 1955–1964
- [Ehrendorfer 1994a] EHRENDORFER, Martin: The Liouville-equation and its potential usefulness for the prediction of forecast skill. Part I: Theory. In: *Mon. Wea. Rev.* 122 (1994), S. 703–713
- [Ehrendorfer 1994b] EHRENDORFER, Martin: The Liouville-equation and its potential usefulness for the prediction of forecast skill. Part II: Applications. In: *Mon. Wea. Rev.* 122 (1994), S. 714–728
- [Ertel 1942] ERTEL, H.: Ein neuer hydrodynamischer Wirbelsatz. In: *Meteor. Z.* 59 (1942), S. 271–281

- [Ertel 1939] ERTEL, Hans: Hydrodynamische Gleichungen in prae-kanonischer Form und Variationsprinzipien der atmosphärischen Dynamik. In: *Meteor. Z.* 56 (1939), S. 105–108
- [Euler 1757] EULER, L.: Principes generaux du mouvement des fluides. In: *Mémoires de l'Academie des Sciences de Berlin* (1757)
- [Exner 1908] EXNER, F. M.: Über eine erste Annäherung zur Vorausberechnung synoptischer Wetterkarten. In: *Meteor. Zeit.* 25 (1908), S. 57–67
- [Fecko 1992] FECKO, Marián: On a geometrical formulation of the Nambu dynamics. In: *J. Math. Phys.* 33 (1992), Nr. 3, S. 926–929
- [Frank et al. 2002] FRANK, J. ; GOTTWALD, G. ; REICH, S.: The Hamiltonian particle-mesh method. In: GRIEBEL, M. (Hrsg.) ; SCHWEITZER, M.A. (Hrsg.): *Meshfree Methods for Partial Differential Equations* Bd. 26. Berlin Heidelberg : Springer-Verlag, 2002 (Lect. Notes Comput. Sci. Eng.), S. 131–142
- [Frank und Reich 2004] FRANK, J. ; REICH, S.: The Hamiltonian particle-mesh method for the spherical shallow water equations. In: *Atmos. Sci. Lett.* 5 (2004), S. 89–95
- [Galewsky et al. 2004] GALEWSKY, Joseph ; SCOTT, Richard ; POLVANI, Lorenzo: An initial-value problem for testing numerical models of the global shallow-water equations. In: *Tellus A* 56 (2004), Nr. 5, S. 429–440
- [Gassmann und Herzog 2008] GASSMANN, Almut ; HERZOG, Hans-Joachim: Towards a consistent numerical compressible nonhydrostatic model using generalized Hamiltonian tools. In: *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 134 (2008), S. 1597–1613
- [Gerschgorin 1931] GERSCHGORIN, S.: Über die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix. In: *Izv. Akad. Nauk. USSR Otd. Fiz.-Mat. Nauk* 7 (1931), S. 749–754
- [Giaquinta und Hildebrandt 1996] GIAQUINTA, Mariano ; HILDEBRANDT, Stefan: *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Bd. 310: *Calculus of variations. I.* Berlin : Springer-Verlag, 1996. – The Lagrangian formalism
- [Griewank 2009] GRIEWANK, Philipp: *A conservative scheme for the multi-layer shallow-water system based on Nambu representation and the ICON grid*, Freie Universität Berlin, Diploma thesis, 2009
- [Hairer et al. 2006] HAIRER, Ernst ; LUBICH, Christian ; WANNER, Gerhard: *Geometric numerical integration.* 2. Springer, 2006. – 515 S.
- [Heikes und Randall 1995] HEIKES, R. ; RANDALL, D.: Numerical integration of the shallow-water equations on a twisted icosahedral grid. Part I: Basic design and results of tests. In: *Mon. Wea. Rev.* 123 (1995), S. 1862–1880

- [Helmholtz 1858] HELMHOLTZ, H.: Über Integrale der hydrodynamischen Gleichungen, welche den Wirbelbewegungen entsprechen. In: *J. Reine Angew. Math.* 55 (1858), S. 25–55
- [Hollingsworth et al. 1993] HOLLINGSWORTH, A. ; KALLBERG, P. ; RENNER, V. ; BURRIDGE, D.M.: An internal symmetric computational instability. In: *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 109 (1993), S. 417–428
- [Hsu und Arakawa 1990] HSU, Y. J. G. ; ARAKAWA, A.: Numerical Modeling of the Atmosphere with an Isentropic Vertical Coordinate. In: *Mon. Wea. Rev.* 118 (1990), S. 1933–1959
- [Hundertmark und Reich 2007] HUNDERTMARK, T. ; REICH, S.: A regularization approach for a vertical-slice model and semi-Lagrangian Störmer-Verlet time stepping. In: *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 133 (2007), Nr. 627, S. 1575–1587
- [Jacobson 1962] JACOBSON, Nathan: *Lie Algebras*. Interscience, 1962
- [Kolmogorov 1941] KOLMOGOROV, A. N.: Local structure of turbulence in an incompressible liquid for very large Reynolds numbers. In: *C.R. Acad. Sci.* 30 (1941), S. 299–301
- [Lamb 1996] LAMB, Jeroen S. W.: Area-preserving dynamics that is not reversible. In: *Physica A: Statistical and Theoretical Physics* 228 (1996), Nr. 1-4, S. 344–365
- [Leimkuhler und Reich 2004] LEIMKUHLE, Benedict ; REICH, Sebastian: *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge University Press, 2004. – 379 S.
- [Lin 1963] LIN, C. C.: Hydrodynamics of helium. In: *II. Proc. Int. Sch. Phys., Vol. XXI*, 1963, S. 93–146
- [Lorenz 1986] LORENZ, E. N.: On the existence of a slow manifold. In: *J. Atmos. Sci.* 43 (1986), S. 1547–1557
- [Lotka 1925] LOTKA, Alfred J.: *Elements of Physical Biology*. Williams and Wilkins, 1925. – 495 S.
- [Ma 2008] MA, Zhong-Qi: *Group theory for physicists*. World Scientific, 2008. – 491 S.
- [Marsden 1999] MARSDEN, J.: *Introduction to mechanics and symmetry*. Springer, 1999
- [Marsden und Weinstein 1974] MARSDEN, J. E. ; WEINSTEIN, A.: Reduction of symplectic manifolds with symmetry. In: *Rep. Math. Phys.* 5 (1974), S. 121–130
- [McLachlan 1999] MCLACHLAN, Robert I.: Area preservation in computational fluid dynamics. In: *Phys. Lett. A* 264 (1999), Nr. 1, S. 36–44
- [McLachlan 2003] MCLACHLAN, Robert I.: Spatial discretization of partial differential equations with integrals. In: *IMA J. Numer. Anal.* 23 (2003), Nr. 4, S. 645–664

- [Morrison und Greene 1980] MORRISON, Philip J. ; GREENE, John M.: Noncanonical Hamiltonian Density Formulation of Hydrodynamics and Ideal Magnetohydrodynamics. In: *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980), Sep, Nr. 10, S. 790–794
- [Nambu 1973] NAMBU, Yoichiro: Generalized Hamiltonian Dynamics. In: *Phys. Rev. D* 7 (1973), Apr, Nr. 8, S. 2405–2412
- [Névir 1998] NÉVIR, P.: *Die Nambu-Felddarstellungen der Hydro-Thermodynamik und ihre Bedeutung für die dynamische Meteorologie*, Freie Universität Berlin, Habilitation thesis, 1998. – 317 S.
- [Névir 2004] NÉVIR, P.: Ertels vorticity theorems the particle relabelling symmetry and the energy-vorticity theory of fluid mechanics. In: *Meteor. Z.* 13 (2004), Nr. 6, S. 485–498
- [Névir und Blender 1993] NÉVIR, P ; BLENDER, R: A Nambu representation of incompressible hydrodynamics using helicity and enstrophy. In: *J. Phys. A: Mathematical and General* 26 (1993), Nr. 22, S. L1189–L1193
- [Névir und Blender 1994] NÉVIR, P ; BLENDER, R: Hamiltonian and Nambu representation of the non-dissipative Lorenz equation. In: *Beiträge zur Physik der Atmosphäre* 67 (1994), S. 133
- [Névir und Sommer 2009] NÉVIR, Peter ; SOMMER, Matthias: Energy-Vorticity Theory of Ideal Fluid Mechanics. In: *J. Atmos. Sci.* 66 (2009), S. 2073–2084
- [Nicolaidis 1992] NICOLAIDES, R. A.: Direct Discretization of Planar Div-Curl Problems. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 29 (1992), Nr. 1, S. 32–56
- [Olver 1990] OLVER, Peter J.: *Applications of Lie groups to differential equations*. Springer, 1990
- [Pandit und Gangal 1998] PANDIT, Sagar A. ; GANGAL, Anil D.: On generalized Nambu mechanics. In: *J. Phys. A: Mathematical and General* 31 (1998), Nr. 12, S. 2899–2912
- [Pedlosky 1979] PEDLOSKY, Joseph: *Geophysical Fluid Dynamics*. Springer, 1979. – 624 S.
- [Phillips 1956] PHILLIPS, N. A.: The general circulation of the atmosphere: a numerical experiment. In: *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 82 (1956), S. 123–164
- [Phillips 1959] PHILLIPS, N. A.: An example of non-linear computational instability. In: *The Atmosphere and the Sea in Motion, Rossby Memorial Volume, New York, Rockefeller Institute Press* (1959), S. 501–504
- [Posch und Hoover 2004] POSCH, H.A. ; HOOVER, W.G.: Large-system phase space dimensionality loss in stationary heat flows. In: *Physica D* 187 (2004), S. 281–293

- [Quispel und McLachlan 2006] QUISPEL, Reinout ; MCLACHLAN, Robert: Special issue on geometrical numerical integration of differential equations. In: *J. Phys. A* 39 (2006), Nr. 19
- [Raviart und Thomas 1977] RAVIART, P.A. ; THOMAS, J.M.: A mixed finite element method for 2nd order elliptic problems. In: *Mathematical aspects of finite element methods.*, Springer Verlag, Lecture Notes in Mathematics, I. Galligani and E. Magenes eds. 1977, S. 292–315
- [Reich 1999] REICH, S.: Backward error analysis for numerical integrators. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 36 (1999), S. 475–491
- [Reich 2006] REICH, S.: Linearly implicit time stepping methods for numerical weather prediction. In: *BIT* 46 (2006), S. 607–616
- [Richardson 1922] RICHARDSON, Lewis F.: *Weather Prediction by Numerical Process.* Cambridge University Press, 1922
- [Ringler und Randall 2002] RINGLER, T. ; RANDALL, D. A.: A Potential Enstrophy and Energy Conserving Numerical Scheme for Solution of the Shallow-Water Equations on a Geodesic Grid. In: *Mon. Wea. Rev.* 130 (2002), S. 1397–1410
- [Sadourny 1975] SADOURNY, R.: The Dynamics of Finite-Difference Models of the Shallow-Water Equations. In: *J. Atmos. Sci.* 32 (1975), S. 680–689
- [Salmon 1988] SALMON, R.: Hamiltonian fluid mechanics. In: *Annu. Rev. Fluid Mech.* 20 (1988), S. 225–256
- [Salmon 2005] SALMON, R.: A general method for conserving quantities related to potential vorticity in numerical models. In: *Nonlinearity* 18 (2005), Nr. 5, S. R1–R16
- [Salmon 2007] SALMON, R.: A general method for conserving energy and potential enstrophy in shallow water models. In: *J. Atmos. Sci.* 64 (2007), S. 515–531
- [Salmon 1998] SALMON, Rick: *Geophysical Fluid Dynamics*. 1. Oxford University Press, 1998. – 378 S.
- [Salmon 2004] SALMON, Rick: Poisson-Bracket Approach to the Construction of Energy- and Enstrophy-Conserving Algorithms for the Shallow-Water Equations. In: *J. Atmos. Sci.* 61 (2004), S. 2016–2033
- [Schutz 1980] SCHUTZ: *Geometrical methods of mathematical physics.* Cambridge University Press, 1980
- [Shin et al. 2009] SHIN, Seoleun ; SOMMER, Matthias ; REICH, Sebastian ; NÉVIR, Peter: Evaluation of two conservative spatial discretization schemes with the Galewsky test. In: *Atm. Sci. Lett. (akzeptiert mit minor revisions)* (2009)

- [Sommer und Névir 2009] SOMMER, Matthias ; NÉVIR, Peter: A conservative scheme for the shallow-water system on a staggered geodesic grid based on a Nambu representation. In: *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 135 (2009), S. 485–494
- [Sommer und Reich 2010] SOMMER, Matthias ; REICH, Sebastian: Phase space volume conservation under space and time discretization schemes for the shallow-water equations. In: *Mon. Wea. Rev. (eingereicht)* (2010)
- [Staniforth et al. 2007] STANIFORTH, A. ; WOOD, N. ; REICH, S.: A time-staggered semi-Lagrangian discretization of the rotating shallow-water equations. In: *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 132 (2007), S. 3107–3116
- [Takhtajan 1994] TAKHTAJAN, Leon: On foundation of the generalized Nambu mechanics. In: *Comm. Math. Phys.* 160 (1994), S. 295–315
- [Thuburn und Li 2000] THUBURN, J. ; LI, Y.: Numerical simulation of Rossby-Haurwitz waves. In: *Tellus* 52A (2000), S. 181–189
- [Vasylykevych und Marsden 2005] VASYLKEVYCH, Sergiy ; MARSDEN, Jerrold E.: The Lie-Poisson Structure of the Euler Equations of an Ideal Fluid. In: *Dynamics of PDE* 2 (2005), S. 281–300
- [Volterra 1926] VOLTERRA, Vito: Variazioni e fluttuazioni del numero d’individui in specie animali conviventi. In: *Mem. R. Accad. Naz. dei Lincei.* 2 (1926), S. 31–113
- [Weber und Névir 2008] WEBER, T. ; NÉVIR, P.: The Dynamic State Index (DSI) - Interpretation and application on the synoptic scale. In: *Tellus* 60 A (2008), S. 1–10
- [Williamson et al. 1992] WILLIAMSON, David L. ; DRAKE, John B. ; HACK, James J. ; JAKOB, Rüdiger ; SWARZTRAUBER, Paul N.: A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry. In: *J. Comp. Phys.* 102 (1992), Nr. 1, S. 211–224
- [Zeitlin 1991] ZEITLIN, V.: Finite-mode analogs of 2D ideal hydrodynamics: Coadjoint orbits and local canonical structure. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 49 (1991), Nr. 3, S. 353–362

Danksagung

Ich danke Peter N evir sowie Sebastian Reich f ur die kompetente und motivierende Betreuung. Almut Ga mann, Hans-Joachim Herzog, Tobias Selz, Antje Clau nitzer, Jason Frank, Michael Hantel und Alexander Bihlo danke ich f ur fachlichen Rat und kollegiale Unterst utzung. Diese Dissertation wurde im Rahmen des DFG-Projektes ‚Strukturerhaltende Numerik‘ angefertigt.