

Untersuchung der Partikel-Lagrangeschen Advektionsmethode anhand von meteorologisch relevanten Beispielen

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Geowissenschaften/Geographie
der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität
in Frankfurt am Main

von
Gábor Ország
aus Székesfehérvár

Frankfurt am Main, 2001
(D F 1)

vom Fachbereich Geowissenschaften/Geographie der
Johann-Wolfgang-Goethe-Universität als Dissertation angenommen.

Dekan: Prof. Dr. W. Oschmann
Gutachter: Prof. Dr. F. Herbert und Dr. J. Steppeler
Datum der Disputation: 23. November 2001

ZUSAMMENFASSUNG

Diese Arbeit beschreibt Entwürfe zur Anwendung einer nicht-interpolierenden Advektionsmethode in numerischen Wettervorhersagemodellen. Es wird an verschiedenen Beispielen dargestellt, in welcher Weise eine solche nicht-interpolierende Methode anstelle von herkömmlichen Differenzen- oder interpolierenden Lagrangeschen Verfahren einsetzbar ist.

Die in der meteorologischen Modellierung neuartige nicht-interpolierende Advektionsmethode verwendet das Partikel-Lagrangesche Konzept von Steppeler (1990a), das die Verlagerung von atmosphärischen Größen mittels Partikeln berechnet, wobei die Partikeln als Luftpakete zu verstehen sind, die sich entlang der Trajektorien bewegen und dabei den Wert der prognostischen Größen erhalten. Diese Eigenschaft der Methode kommt vor allem dann zum Tragen, wenn die Verteilung der prognostischen Größen durch Sprungfunktionen beschrieben wird, da Näherungsfehler der bislang verwendeten Methoden, wie Oszillation und Glättung, an solchen Gradienten verstärkt auftreten.

Die Untersuchung der Genauigkeit und Anwendbarkeit der nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Methode findet durch Modellstudien statt. Die Methode selbst wird am Beispiel verschiedener Anfangswert-Aufgaben für ein dichtekonstantes barotropes Flachwasser-System beschrieben, gefolgt von der Nachbildung von zwei Ausbreitungsszenarien für chemisch träge Stoffe in einer hydrostatischen Modellatmosphäre, sowie des trocken- und feuchtadiabatischen Aufstiegs einer warmen Luftblase unter nicht-hydrostatischen Bedingungen. Im Hinblick auf numerische Fehler wird gefordert, daß die numerische Lösung monoton bleibt, wobei unter Monotonität ein oszillationsfreier Verlauf der Lösung verstanden wird. Mittels Vergleich zwischen den numerischen Lösungen wird festgestellt, daß die Genauigkeit der nicht-interpolierenden numerischen Lösung mit Ausnahme einer Anfangswert-Aufgabe gleich oder höher ist als bei den mit herkömmlichen Methoden erzielten Resultaten. Eine herausragende Steigerung der Genauigkeit ist dann zu beobachten, wenn die Advektion im Vergleich zu anderen Prozessen eine viel stärkere Rolle spielt, wie z.B. im Falle der Konvektion in trockener Atmosphäre.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung	1
2	Das Problem der Modellierung der Advektion	5
2.1	Modellgleichungen	5
2.2	Diskretisierung, Fehlertypen, Genauigkeit	8
2.3	Finite Differenzen	12
2.4	Näherung durch Basisfunktionen (GALERKIN-Methode)	16
2.5	Diskretisierung mit finiten Volumina	18
2.6	Semi-Lagrangesche Methoden	19
3	Die nicht-interpolierende Methode	29
3.1	Das barotrope Modell	30
3.2	Passive Advektion mit konstanter Geschwindigkeit in einer Dimension	30
3.3	Transformationsbeziehungen	33
3.4	Das Zeitschema	34
3.5	Ergebnisse	36
4	Anwendungsbeispiele	45
4.1	Ausbreitungsrechnungen	45
4.1.1	Die Eulerschen und nicht-interpolierenden Lösungsmethoden	47
4.1.2	Ergebnisse der Ausbreitungsrechnungen	49
4.2	Konvektionsexperimente	58
4.2.1	Das dynamische Modell	59
4.2.2	Numerische Lösungsmethoden	61
4.2.3	Ergebnisse der Modellvergleiche für trockene Konvektion	64
4.2.4	Ergebnisse der Modellvergleiche für feuchte Konvektion	69
5	Schlussbemerkungen	77
A	Ergänzende Rechnungen	81

1

EINLEITUNG

Die numerische Berechnung von atmosphärischen Zustandsänderungen ist eine der kompliziertesten Aufgaben von fluiddynamischen Modellsimulationen. Sie erfordert die Behandlung zahlreicher physikalischer Prozesse, im Besonderen die räumliche Verlagerung durch Advektion.

Herkömmliche Näherungsberechnungen der Advektion sind zumeist mit sehr großen Fehlern behaftet, wenn die Feldfunktionen der prognostischen Größen Unstetigkeiten enthalten. Solche Unstetigkeiten entstehen in erster Linie in der Verteilung von Stoffkomponenten, wie z.B. Wolkenwasser, Wolkeneis oder freigesetzten chemischen Substanzen.

Die Näherungsfehler kann man in der numerischen Lösung entweder als hochfrequente Oszillationen oder als geglättete Gradienten beobachten. Die lineare Analyse der angewandten Näherungen zeigt, daß Oszillationen dann entstehen, wenn die diskreten Gleichungen die Wellenausbreitung wellenzahlabhängig beschreiben. Die Ursache für geglättete Gradienten in der numerischen Lösung liegt am dissipativen Zusatzeffekt der Näherung.

Beiden Fehlertypen ist eine unterschiedliche Wirkungsweise zuzuschreiben. Der Glättungseffekt behaftet alle Anfangsbedingungen gleichermaßen, auch die, die im mathematischen Sinne als glatt gelten. Oszillationen treten hingegen bei glatten Anfangsbedingungen in kaum wahrnehmbarer Form auf. Sie verstärken sich erst bei Unstetigkeiten, z.B. an einem Wolkenrand, mit ausgeprägter Amplitude und zerstören den monotonen Verlauf der prognostischen Größen. Eine hinreichend genaue Berechnung der Wolkendynamik erfordert deshalb Verfahren, die oszillationsfrei sind und die Gradienten am Wolkenrand möglichst erhalten. In der Literatur wird diese Eigenschaft mit den Begriffen *shape preserving* oder *monotonitätserhaltend* bezeichnet.

Monotone numerische Lösungen erhält man mit Hilfe von nicht-oszillierenden Näherungsmethoden. Die Voraussetzung dafür ist eine solche diskrete Formulierung der zu lösenden Differentialgleichung, in der alle Terme, die Oszillation verursachen, verschwinden oder sich gegen andere Terme aufheben. Dabei können andere Terme insbesondere auch diejenigen sein, die Glättungsfehler erzeugen. Das heißt, daß Glättung unter Umständen sogar benötigt wird um die Entstehung von Oszillationen zu unterdrücken.

1. Einleitung

Die Genauigkeit von numerischen Methoden wird einerseits durch lineare Analyse der Stabilität und Konsistenz der Näherung, bzw. Konvergenz der numerischen Lösung überprüft. Beispiele dafür gibt es z.B. bei Haltiner & Williams (1980). Auf der anderen Seite werden verschiedene Testaufgaben numerisch berechnet. Solche Aufgaben stellen vereinfachte, aber physikalisch relevante Bedingungen dar. Wenn die analytische Lösung einer Aufgabe existiert, läßt sich diese mit der numerischen Lösung vergleichen. Bei analytisch nicht lösbaren Aufgaben wird das Lösungsverhalten qualitativ bewertet. Dabei wird berücksichtigt, daß die Näherungsfehler eines Advektionsverfahrens im Falle einer nicht linearen Gleichung in mehreren Raumdimensionen ebenso auftreten wie bei der eindimensionalen passiven Advektion.

Das bekannteste Beispiel der Testaufgaben ist die Berechnung der passiven Advektion einer Feldgröße. Gemeint ist die räumliche Verlagerung einer vorgegebenen Feldverteilung mit vorgegebener Geschwindigkeit. Die Geschwindigkeit und das zu verlagernde Feld sind dabei voneinander entkoppelt. Bei homogener Geschwindigkeit entspricht der Ablauf der passiven Advektion der Bewegung eines starren Körpers. In einer Raumdimension betrachtet stellt dies die einfachste Art der Testaufgaben dar, deren fehlerfreie Lösung, wie Chock (1991) und Müller (1992) zeigen, als notwendige Bedingung für Advektionsverfahren gilt.

Als zweidimensionale Erweiterung der passiven Advektion sind drei wichtige Testfälle zu nennen. Dies sind die von Zalesak (1979) eingeführte starre Rotation einer Flüssigkeit um eine vorgegebene Drehachse, der Deformationstest von Smolarkiewicz (1983) und die spiralförmige Rotation von Doswell (1984). Sie dienen in erster Linie dazu, mehrdimensionale Lösungsverfahren zu untersuchen.

Für realitätsnähere Probleme, wie das konvektive Aufsteigen einer warmen Luftblase, das unter anderem von Grabowski & Smolarkiewicz (1990), Lin *et al.* (1994), Pellerin *et al.* (1995), Grabowski & Smolarkiewicz (1996) und Margolin *et al.* (1997) untersucht wurde, existieren keine analytischen Lösungen. Die Genauigkeit der numerischen Lösungen wird deshalb nach dem Gesichtspunkt der Monotonitätserhaltung bewertet. Das heißt, daß die prognostischen Variablen entlang der Unstetigkeiten oszillationsfrei und mit möglichst wenig Glättung advehiert werden sollten.

Die Lösung der barotropen Vorticitygleichung, die die Advektion der Größe Vorticity beschreibt, gehört ebenfalls zu den zweidimensionalen Problemstellungen. Da Vorticity sich aus ersten räumlichen Ableitungen der Geschwindigkeit zusammensetzt, hängt in diesem Fall die zu advehierende Größe selbst von der Advektionsgeschwindigkeit ab. Deshalb erfordert die Berechnung der Advektion außer der Kenntnis des Geschwindigkeitsfeldes auch die der räumlichen Differentialquotienten desselben. Wenn Felder der

Vorticity durch Konturen von ihrer Umgebung getrennt sind, werden solche Advektionsmethoden benötigt, die in erster Linie nicht oszillierende Ergebnisse gewährleisten. Insbesondere sind es solche Verfahren, die die Advektion jener Konturen mit hoher Genauigkeit berechnen. Beispiele für derartige Berechnungen gibt es unter anderem bei Hasselbeck (1996).

Die Entwicklung monotoner Advektionsverfahren nahm folgenden Verlauf: Die ersten wichtigen Beiträge zur Entwicklung monotoner Advektionsverfahren entstanden mit der Diskussion von *Eulerschen* Differenzenmethoden für die atmosphärische Advektion durch Crowley (1968), für astrophysikalische Berechnungen durch Boris & Book (1973), Zalesak (1979) und Colella & Woodward (1984). Weitere Beiträge für die meteorologische Modellierung haben Tremback *et al.* (1987) mit der allgemeineren Formulierung des Verfahrens von Crowley (1968) sowie Smolarkiewicz (1983) geleistet, dessen Methode in zahlreichen Arbeiten, wie z.B. Grabowski & Smolarkiewicz (1990) Anwendung fand. Schließlich sind noch unter den *Eulerschen* Advektions- und Flußverfahren die Beiträge von Bott (1992), von der Emde (1992), Easter (1993), Hólm (1995) und VanderHeyden & Kashiva (1998) zu erwähnen.

Parallel zu den *Eulerschen* Lösungsmethoden wurde auch in der meteorologischen Modellierung die Idee der *Lagrangeschen* Integration der zu lösenden Gleichungen entlang von Flüssigkeitstrajektorien verfolgt. Die erste Arbeit dazu erschien von Wiin-Nielsen (1959). Die eigentlich praktikable Formulierung von *Lagrangeschen* Methoden als Gitterpunktmethod wurde von Robert (1981, 1982) beschrieben. Im Zusammenhang damit analysierte McDonald (1984, 1986, 1987) die Anwendung von Rückwärtstrajektorien und Interpolationspolynomen und zeigte, daß die interpolierende Übertragung von Feldinformation die gleichen Näherungsfehler (Oszillationen und Glättung) hervorruft wie *Eulersche* Methoden. Man hat gleichzeitig festgestellt, daß die Genauigkeit der Lösung vergleichbar ist mit *Eulerschen* Lösungen, obwohl stabilitätsbedingt auch ein längerer Integrationsschritt möglich ist als bei *Eulerschen* Methoden. Dies beschleunigte die Untersuchung der Anwendbarkeit von *Lagrangeschen* Methoden. Deren Ausarbeitung im Hinblick auf die routinemäßige numerische Wettervorhersage nahmen unter anderem Temperton & Staniforth (1987) und Bates *et al.* (1990) vor. Monotone *Lagrangesche* Advektionsverfahren zur Berechnung der kleinskaligen Advektion von Stoffkomponenten wurden von Carpenter *et al.* (1990), Lin *et al.* (1994), Laprise & Plante (1995), Machenhauer & Olk (1995) und Leonhard *et al.* (1996) entwickelt. Einen breiten Überblick über die meteorologische Anwendung von *Lagrangeschen* Methoden erhält man in den zusammenfassenden Artikeln von Staniforth & Côté (1991), Staniforth & Côté (1998) und McDonald (1998).

1. Einleitung

In dieser Arbeit wird ein solches Lagrangesches Verfahren dargestellt, das als nicht-interpolierende Partikel-Lagrangesche Methode bezeichnet wird. Es unterscheidet sich von den herkömmlichen Methoden dadurch, daß die Simulation die Advektion direkt, nämlich über bewegliche, mitströmende Luftpartikeln bzw. -pakete und ohne diskrete Operatoren beschreibt. Deshalb treten weder Glättungs- noch Oszillationsfehler durch Interpolation auf, und die Methode ist in der Lage, die Aufgabe der homogenen Advektion exakt zu lösen. Das hier verwendete Verfahren basiert auf der Arbeit von Steppeler (1990a) und wurde von Steppeler & Ország (1995) weiterentwickelt¹. In den weiteren Kapiteln wird die Entwicklung und Implementierung dieser im Hinblick auf die numerische Wettervorhersage neue Approximation von Advektionstermen an einfachen Testaufgaben und meteorologischen Beispielen diskutiert. Zunächst wird in einem räumlich eindimensionalen barotropen Flachwassersystem die Verlagerung einer ROSSBY-Welle bzw. die Überströmung eines glockenförmigen GAUSS-Berges mit konstanter Windgeschwindigkeit untersucht. Zudem werden vergleichende Ausbreitungsrechnungen für Spurenstoffe, die im Rahmen eines europäischen Ausbreitungsexperimentes ausgestoßen worden sind, bzw. numerische Experimente zur trockenen und feuchten Konvektion in einem nicht-hydrostatischen System durchgeführt. Die Darstellung der barotropen Modellrechnungen findet in Kapitel 3 statt. Die Ausbreitungsszenarien werden in Kapitel 4.1 beschrieben, die Berechnungen der trockenen und feuchten Konvektion in Kapitel 4.2.

¹Ähnliche Partikelverfahren werden unter anderem in astrophysikalischen Simulationen verwendet (Monaghan, 1982; Monaghan & Gingold, 1983; Monaghan, 1985, 1988, 1992).

DAS PROBLEM DER MODELLIERUNG DER ADVEKTION

2.1 Modellgleichungen

Die Untersuchung strömender Flüssigkeiten läßt sich sowohl experimentell über Versuchsreihen unter geeigneten Laborbedingungen als auch durch die Lösung der EULERSchen und der NAVIER-STOKESSchen partiellen Differentialgleichungen durchführen. Die mathematische Struktur und die Komplexität dieser Gleichungen, die auch als Grundlage der operationellen Wettervorhersage-Systeme dienen, motivieren die Lösung der Gleichungen mittels Näherungsansätze wie z.B. durch numerische Lösungsverfahren.

Die Entwicklung und Analyse numerischer Näherungsverfahren setzt die Lösung des vollständigen Systems der Grundgleichungen nicht voraus. Man kann einzelne Prozesse isoliert, gewissermaßen als Modellvorgang betrachten und sich auf die numerische Lösung der zugehörigen Modellgleichungen konzentrieren, denn sie sind leichter zu lösen, als komplexe Systeme und die Erkenntnisse über typische Näherungsfehler verschiedener numerischer Methoden lassen sich auf das komplexe System übertragen.

Der Ausgangspunkt zur Herleitung der EULERSchen oder NAVIER-STOKESSchen Gleichungen ist die Integralform der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung. Zur Darstellung der Problematik, die in der numerischen Berechnung der Advektion verborgen ist, wird hier das repräsentative Beispiel der Massenerhaltung betrachtet, um daraus die entsprechende Modellgleichung der Advektion zu erhalten.

Die Partialmasse einer beliebigen Substanz M_n unterliegt im finiten Volumen $V(t)$ Phasenumwandlungen und chemischen Reaktionen, die eine Änderungsrate der Partialmasse

$$\frac{dM_n}{dt} = R_n \quad (2.1)$$

bewirken. Zu M_n und R_n gehören die Dichten ϱ_n und r_n , die durch die Volumenintegrale

$$M_n = \int_{V(t)} \varrho_n dV \quad \text{bzw.} \quad R_n = \int_{V(t)} r_n dV$$

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

definiert sind. Der Index n bezeichnet die Stoffkomponenten innerhalb des Volumens $V(t)$, insbesondere trockene Luft, Wasserdampf und Flüssigwasser, aber auch die Mischgase der Luft, wie Sauerstoff und Stickstoff.

Für Gleichung (2.1) kann bei Verwendung der Dichtefelder ϱ_n und r_n folgende Formulierung abgeleitet werden:

$$\int_{V(t)} \frac{\partial \varrho_n}{\partial t} dV + \int_{\partial V} \varrho_n \mathbf{v}_n \cdot \mathbf{n} df = \int_{V(t)} r_n dV . \quad (2.2)$$

Der erste Term auf der linken Seite von (2.2) beschreibt die lokale Änderung der Masendichte ϱ_n im Volumen $V(t)$, der zweite den Fluß der Dichte ϱ_n , der mit der Eigengeschwindigkeit der Substanz \mathbf{v}_n durch die Berandung ∂V von $V(t)$ stattfindet. Der Normalvektor \mathbf{n} des Flächenelementes df sei dabei nach außen gerichtet. Die Anwendung des GAUSSSchen Integralsatzes auf das Flächenintegral erlaubt dessen Umwandlung in ein Volumenintegral

$$\int_V \left\{ \frac{\partial \varrho_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_n \mathbf{v}_n) - r_n \right\} dV = 0 . \quad (2.3)$$

Die Gültigkeit von (2.3) ist unabhängig vom Volumen, das heißt der Integrand erfüllt die Nullbedingung und ermöglicht, (2.3) in der Divergenzform

$$\frac{\partial \varrho_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_n \mathbf{v}_n) = r_n \quad (2.4)$$

zu schreiben. Die Gleichung (2.4) heißt die *Bilanzgleichung* der Substanz ϱ_n und besagt, daß die lokalzeitliche Änderung der Partialdichte ϱ_n sich aus der Divergenz des *konvektiven Flusses* $\nabla \cdot \varrho_n \mathbf{v}_n$ und aus der Dichte der Umwandlungsraten r_n zusammensetzt. Aus (2.4) ergibt sich unter Berücksichtigung der baryzentrischen Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \left(\sum_n \varrho_n \right)^{-1} \sum_n \varrho_n \mathbf{v}_n = \varrho^{-1} \sum_n \varrho_n \mathbf{v}_n$ und der physikalischen Nebenbedingung $\sum_n r_n = 0$ die Kontinuitätsgleichung der Gesamtmasse

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v}) = 0 . \quad (2.5)$$

In der Bilanzgleichung (2.4) kann der konvektive Fluß statt auf die Eigengeschwindigkeit \mathbf{v}_n auf die baryzentrische Geschwindigkeit \mathbf{v} bezogen definiert werden, sodaß die Divergenz des Diffusionsstromvektors $\mathbf{j}_n = \varrho_n (\mathbf{v}_n - \mathbf{v})$ in der so entstandenen Bilanzgleichung zusätzlich berücksichtigt werden muß

$$\frac{\partial \varrho_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_n \mathbf{v}) = r_n - \nabla \cdot \mathbf{j}_n . \quad (2.6)$$

2.1. Modellgleichungen

Die Bilanzgleichung (2.6) läßt sich, unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung (2.5) und der Definition der Konzentration $q_n = \varrho_n / \varrho$, als

$$\varrho \left(\frac{\partial q_n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla q_n \right) = r_n - \nabla \cdot \mathbf{j}_n \quad (2.7)$$

schreiben. Gleichung (2.7) heißt die *advective Form* der Bilanzgleichung.

Der Zusammenhang zwischen den linken Seiten von (2.6) und (2.7) wird unter der Annahme ersichtlich, daß keine Erzeugungsbeiträge vorhanden sind ($r_n = 0$) und die Eigengeschwindigkeit der Substanz gleich der baryzentrischen Geschwindigkeit ist ($\mathbf{v}_n = \mathbf{v}$). Somit folgt für die vereinfachte Form der Bilanzgleichung

$$\frac{\partial \varrho_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_n \mathbf{v}) = 0 \quad (2.8)$$

die äquivalente Formulierung

$$\varrho \left(\frac{\partial q_n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla q_n \right) = - q_n \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v}) \right) = 0. \quad (2.9)$$

Nach Anwendung des EULERSchen Operators

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (2.10)$$

und der Kontinuitätsgleichung (2.5) erhält man daraus die Erhaltungsbedingung

$$\frac{dq_n}{dt} = \dot{q}_n = 0. \quad (2.11)$$

Da die totale Feldableitung der Konzentration q_n null ist, bleibt q_n während der Verlagerung mit der Strömung entlang einer Trajektorie materiell unverändert.

Die materielle Änderung im Sinne von (2.11) setzt sich aus der lokalzeitlichen Ableitung $\partial q_n / \partial t$ und aus dem *advektiven Anteil* oder *Advektionsterm* $\mathbf{v} \cdot \nabla q_n$ zusammen. Obwohl ein ähnlicher Advektionsterm, wie $\mathbf{v} \cdot \nabla q_n$, auch in der Divergenz des konvektiven Flusses

$$\nabla \cdot (\varrho_n \mathbf{v}) = \underbrace{\mathbf{v} \cdot \nabla \varrho_n}_{\text{Advektionsterm}} + \overbrace{\varrho_n \nabla \cdot \mathbf{v}}^{\text{Divergenzterm}} \quad (2.12)$$

vorhanden ist, konzentrieren sich *numerische Advektionsverfahren* auf die numerische Berechnung von $\mathbf{v} \cdot \nabla q_n$. Solche Methoden, die die Bilanzgleichung in der Form von

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

(2.8) (oder die Kontinuitätsgleichung (2.9)) lösen und dazu die Divergenz des konvektiven Flusses $\nabla \cdot (\rho_n \mathbf{v})$ berechnen, heißen *Flußverfahren*. In beiden Fällen, wenn also der Term $\mathbf{v} \cdot \nabla q_n$ mit einer Advektionsmethode oder die Flußdivergenz $\nabla \cdot (\rho_n \mathbf{v})$ mit einem Flußverfahren explizit auszurechnen ist, spricht man von EULERSchen Methoden. Im Gegensatz dazu umgehen LAGRANGESche Verfahren die Näherung der räumlichen partiellen Ableitungen, in dem sie im materiellen System die Gleichungen (2.1) (unter der genannten Bedingung $r_n = 0$ lautet dies $dM_n/dt = 0$) bzw. (2.11) lösen.

2.2 Diskretisierung, Fehlertypen, Genauigkeit

Die Aufgabe der Näherungsmethoden besteht darin, die Berechnung partieller Ableitungen in den Modellgleichungen zu ermöglichen. Vor dem Überblick über die am häufigsten angewandten Näherungsmethoden sollen zunächst zwei Modellgleichungen betrachtet werden, deren numerische Lösungen als Beispiele für Näherungsmethoden und -fehler diskutiert werden.

Zum einen handelt es sich um die Gleichung (2.9) für $q_n = \phi(x, t)$, in einer Raumdimension, mit periodischen Randbedingungen $\phi(x, t) = \phi(x + a, t)$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0. \quad (2.13)$$

Sie wird als *Advektions-* oder *Konvektionsgleichung* bezeichnet. Aus der Theorie der linearen partiellen Differentialgleichungen ist bekannt, daß die Eigenfunktionen $e^{i\mu s}$ des Operators $\partial/\partial s$ geeignete Lösungsfunktionen für (2.13) sind. Der Ansatz $\phi(x, t) = e^{i\omega t} e^{i\kappa x}$ löst deshalb (2.13), wenn die Eigenwerte der Differentialoperatoren die Bedingung $i\omega = -u i\kappa$ erfüllen. Die allgemeine Lösung für die Wellenzahl κ als $\phi = \phi_0 e^{i\kappa(x-ut)}$ beschreibt die Bewegung einer Wellenfront als Verschiebung entlang der x Koordinate.

Als zweite Modellgleichung soll die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.14)$$

angesprochen werden, deren rechte Seite die eindimensionale Form des Termes $\nabla \cdot \mathbf{j}_n$ aus (2.6) darstellt, wenn für den Diffusionsstromvektor die Annahme $\mathbf{j}_n = -\mathbf{e}_x D \partial \phi / \partial x$ und $D = \text{const.}$ getroffen wird. Entsprechend folgt für die Flußdivergenz im Falle eines konstanten Diffusionskoeffizienten D der Ausdruck $D(\partial^2 \phi / \partial x^2)$. Aus (2.14) erhält man die analytische Lösung $\phi = A e^{i\kappa x}$ mit der zeitlich exponentiell gedämpften Amplitude $A = \phi_0 e^{-D\kappa^2 t}$. Diffusion ist ein dissipativer Prozess, der so lange andauert, solange im Sinne der getroffenen Annahme die Massendichte ϕ nicht homogen verteilt ist. Bekanntlich ist ein solcher Vorgang für den molekularen Austausch von ϕ charakteristisch,

2.2. Diskretisierung, Fehlertypen, Genauigkeit

weshalb der oben getroffene Ansatz unter anderem auch für die Berechnung der Wärmeleitung anwendbar ist. Mit Hilfe von Diffusionsansätzen werden in der Fluidodynamik und der meteorologischen Modellierung auch andere Prozesse berücksichtigt, wie turbulenter Austausch oder innere Reibung. Welche Rolle diffusive Terme in diskretisierten Gleichungen spielen, wird im nächsten Abschnitt im Zusammenhang mit Näherungsmethoden durch finite Differenzen erörtert.

Dazu betrachtet man die einfachste Form der Diskretisierung, wobei die unabhängigen Variablen die Zeit t und die Länge x sind. Mit

$$\begin{aligned}x &= x_j = j \cdot \Delta x \\t &= t_n = n \cdot \Delta t\end{aligned}\tag{2.15}$$

werden sie in gleichmäßige Intervalle Δt und Δx geteilt und für die Feldgröße ϕ wird die Diskretisierung gemäß

$$\phi_j^n = \phi(x_j, t_n)\tag{2.16}$$

definiert.

Die Differenzennäherung der Ableitungen der stetig differenzierbaren Funktion ϕ erfolgt mit der TAYLOR-Reihenentwicklung. Bei festgehaltenem t wird für $\phi_{j+k} \equiv \phi[(j+k)\Delta x]$ eine Reihenentwicklung an der Position $j\Delta x$ vorgenommen:

$$\phi_{j+k} = \phi_j + (k\Delta x) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j + \frac{1}{2} (k\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_j + \dots\tag{2.17}$$

Mit der im Prinzip unendlichen Funktionsreihe (2.17) ergeben sich für jedes $k = \pm 1, \pm 2, \dots$ verschiedene lokale Differenzennäherungen. Mit $k = 1$ erhält man

$$\frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j + \frac{1}{2} \Delta x \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_j + \dots,\tag{2.18}$$

und aus der Differenz der Reihen mit $k = 1$ und $k = -1$

$$\frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j + \frac{1}{6} (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_j + \dots\tag{2.19}$$

Aus (2.18) und (2.19) ist es ersichtlich, daß die linken Seiten die erste Ableitung $(\partial\phi/\partial x)_j$ mit einem gewissen Fehlermaß darstellen. Der Fehler setzt sich aus den Summanden hinter der ersten Ableitung zusammen. Die niedrigste Potenz des Abstandes Δx , die in der

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

Restreihe vorkommt, gibt die Ordnung der Näherung an; der entsprechende Fehlerterm wird mit \mathcal{R} bezeichnet. Damit gelten für die Differentialquotienten folgende Näherungen:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_j = \begin{cases} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} + \mathcal{R}(\Delta x) & \text{einseitige Differenz} \\ \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} + \mathcal{R}((\Delta x)^2) & \text{zentrierte Differenz} \end{cases} \quad (2.20)$$

Ebenfalls zweiter Ordnung genau ist die Näherung der zweiten Ableitung durch zentrierte Differenzen

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_j = \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{(\Delta x)^2} + \mathcal{R}((\Delta x)^2). \quad (2.21)$$

In der meteorologischen Modellierung werden (2.20) und (2.21) häufig verwendet, wobei solche Differenzen auch zur Näherung von Zeitableitungen gebildet werden können. Für die zentrierten Differenzen in (2.20) und (2.21) werden die Bezeichnungen $\delta_x\phi_j = (\phi_{j+1} - \phi_{j-1})/(2\Delta x)$ und $\delta_{xx}\phi_j = (\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1})/(\Delta x)^2$ eingeführt.

Am Beispiel von (2.20) ist es ersichtlich, daß sowohl einseitige als auch zentrierte Differenzen sinnvolle Näherungen für $(\partial\phi/\partial x)_j$ sind. Die Ordnung der Näherung ist zwar ein gut definierbares Maß, gibt jedoch keine Auskunft über die Auswirkung der Diskretisierung auf die zu erzielende Lösung. Für diese Abschätzung muß eine FOURIER-Analyse der numerischen Lösung durchgeführt werden, um zu entscheiden, ob die *Genauigkeit* der Näherungen hinreichend ist und ob das Lösungsverfahren, in dem sie verwendet werden, *konsistent* und *stabil* ist. Nach dem Äquivalenz-Theorem von LAX sind das die notwendigen Bedingungen für *konvergente* Lösungen und sie werden an dieser Stelle wie folgt definiert. Die diskrete Formulierung einer zu lösenden Gleichung ist *konsistent*, wenn sie beim Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ bzw. $\Delta x \rightarrow 0$ in die kontinuierliche Form übergeht. Eine numerische Lösung ist *stabil* für das gegebene Intervall der unabhängigen Variablen, wenn die Amplitude der Lösung nicht stetig ansteigt. Die *Konvergenz* der numerischen Lösung bedeutet den Übergang in die kontinuierliche Lösung, wenn $\Delta t \rightarrow 0$ bzw. $\Delta x \rightarrow 0$.

Zur Darstellung der Genauigkeit, mit der Wellenamplituden und Phasengeschwindigkeiten abgebildet werden, empfiehlt es sich, für (2.13) folgende Näherung zu betrachten

$$\frac{\partial\phi_j}{\partial t} + u\delta\phi_j = 0, \quad (2.22)$$

wobei für den Differenzenoperator $\delta\phi_j$ der Definitionsansatz

$$\delta\phi_j = [\delta_x + \varepsilon\delta_{xx}]\phi_j \quad (2.23)$$

2.2. Diskretisierung, Fehlertypen, Genauigkeit

gilt und der Parameter ε als Vorfaktor von δ_{xx} klein gehalten werden soll. Über die Eigenschaften des Operators δ ist zu bemerken:

1. wie $e^{i\kappa x}$ für $(\partial/\partial x)$, ist $e^{i\kappa x_j}$ für δ die Eigenfunktion, denn
 $\delta_x e^{i\kappa x_j} = e^{i\kappa x_j} i \sin \kappa \Delta x / \Delta x = e^{i\kappa x_j} i \kappa^*$, und
 $\delta_{xx} e^{i\kappa x_j} = 2e^{i\kappa x_j} (\cos \kappa \Delta x - 1) / (\Delta x)^2 = -4e^{i\kappa x_j} \sin^2(\kappa \Delta x / 2) / (\Delta x)^2$.
2. Der asymmetrische Punktoperator δ_x entfaltet seine Wirkung über den imaginären Anteil des Eigenwertes von δ , das heißt über die ungeraden Ableitungen der TAYLOR-Reihe von (2.20), sowie die asymmetrische Sinus-Funktion und verursacht *Phasenfehler*. Dies schlägt sich in den numerischen Wellenlösungen als *Dispersion* nieder, weil die Ungenauigkeit wegen $\kappa^*/\kappa = u^*/u = \sin \kappa \Delta x / (\kappa \Delta x)$ wellenzahlabhängig ist. Dadurch ist die Anwendbarkeit von δ_x auf die kleinen Werte von $\kappa \Delta x$ eingeschränkt, denn nur für lange Wellen gilt $\sin \kappa \Delta x / (\kappa \Delta x) \approx 1$.
3. wenn $\varepsilon > 0$, enthält die Diskretisierung von $(\partial\phi/\partial x)_j$ den Operator δ_{xx} . Dies ist fehlerhaft, da δ_{xx} die zweite partielle Ableitung approximiert. Die Präsenz von δ_{xx} in δ hat auf Grund der Erkenntnisse aus der Diffusionsgleichung (2.14), im Gegensatz zum Phasenfehler durch δ_x , einen *Amplitudenfehler* zu Folge, denn der symmetrische Punktoperator δ_{xx} ist über die geraden Ableitungen der TAYLOR-Reihe (2.21) bzw. über die symmetrische Cosinus-Funktion mit den reellen Eigenwerten von δ assoziiert.

Die Lösung der Differentialgleichung (2.13) bedarf neben der Näherung der partiellen Ableitungen nach x auch Integrationsmethoden, wofür insbesondere Differenzennäherungen, wie (2.20) und (2.21) in Frage kommen. Allerdings können die Integrationsmethoden nicht beliebig sein. Sie müssen im Verbund mit der Näherung von $\partial\phi/\partial x$ in erster Linie *Stabilität* gewährleisten. Die Stabilitätsanalyse gibt an, ob die Amplitude einer Lösung durch die verwendete Diskretisierung im Laufe der Lösungsschritte zunimmt oder nicht. Mit dem geeigneten Lösungsansatz $\phi(x_j, t_n) = e^{\lambda t_n} e^{i\kappa x_j}$, lautet ϕ am Punkt $j + \beta$ zum Zeitpunkt $n + \gamma$

$$\phi_{j+\beta}^{n+\gamma} = e^{\lambda\gamma\Delta t} e^{i\kappa\beta\Delta x} \phi_j^n. \quad (2.24)$$

Mit $e^{\lambda\gamma\Delta t} = (e^{\lambda\Delta t})^\gamma$ lautet die *Bedingung der Stabilität* für eine beliebige Differenzengleichung

$$\left| (e^{\lambda\Delta t})^\gamma \right| = |\xi^\gamma| \leq 1. \quad (2.25)$$

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

Aus $e^{\lambda \Delta t} = (e^{\lambda \Delta t})^l$ folgt, daß in dem Fall, wenn das Integrationsverfahren l Zeitintervalle, das heißt $l + 1$ Zeitpunkte für die Näherung von $\partial \phi / \partial t$ benötigt, $\xi = e^{\lambda \Delta t}$ mit Hilfe eines Polynoms l -ten Grades zu bestimmen ist, denn die Zeitableitung läßt sich am Punkt j in folgender Weise ausdrücken

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_j^n = \sum_{l=-l_1}^{l_2} w_l \phi_j^{n+l} = \phi_j^n \sum_{l=-l_1}^{l_2} w_l e^{\lambda l \Delta t} = \phi_j^n \sum_{l=-l_1}^{l_2} w_l \xi^l = \phi_j^n P_l(\xi), \quad (2.26)$$

wobei das Intervall $[n - l_1, n + l_2]$ die vom Zeitschema benötigten Zeitpunkte umfaßt. Die Gewichte w_l sind je nach Differenzennäherung unterschiedlich und mindestens eines davon enthält die Eigenwerte des Operators δ . Bei der Berechnung sind alle ξ^l -s mit demselben λ zu berücksichtigen und (2.25) ist für jedes ξ^l zu erfüllen.

Die Abschätzung der Phasen- und Amplitudenfehler geschieht mit Hilfe von ξ . Angenommen, daß aus der gewählten zeitlichen und räumlichen Diskretisierung ξ resultiert, gilt $\xi \approx e^{i\omega \Delta t}$, wobei ω als reelle Zahl die physikalisch richtige Frequenz bedeutet. Mit der Bezeichnung $\Re(\xi)$ für den reellen Anteil und $\Im(\xi)$ für den imaginären Anteil von ξ lautet der Amplitudenfehler $1 - |\xi| = 1 - \sqrt{\Re(\xi)^2 + \Im(\xi)^2}$ und der Phasenfehler $\omega \Delta t - \arctan(\Im(\xi)/\Re(\xi))$.

2.3 Finite Differenzen

Als Beispiel für Differenzennäherungen betrachte man jetzt zwei solche Lösungsmethoden für (2.13), die in der Praxis der meteorologischen Modellierung weit verbreitet sind. Dies sei

1. das *leap-frog* Verfahren

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{R}((\Delta t)^2) + u \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n}{2\Delta x} + \mathcal{R}((\Delta x)^2) = 0, \quad (2.27)$$

in dem die partiellen Ableitungen beider unabhängiger Variablen mit finiten Differenzen (2.20) approximiert werden. Die räumliche Diskretisierung in (2.27) besteht, im Gegensatz zum allgemeinen Definitionsansatz (2.23), ausschließlich aus dem Operator δ_x , weshalb die räumliche Diskretisierung in (2.27) nur Phasenfehler verursacht, die gemäß der TAYLOR-Reihe der zentrierten Differenz (2.20) dritter Ordnung sind. Bezüglich der Zeitableitung kann man an der linken Seite von (2.27) ablesen, daß deren Näherung zwei Intervalle überspannt, sie ist zweiter Ordnung genau, und man bekommt ein Polynom zweiten Grades $P_2(\xi) = \xi^2 + 2i\xi c \sin \kappa \Delta x - 1$, dessen zwei Nullstellen jeweils einer Lösungsfamilie entsprechen. Eine der beiden

2.3. Finite Differenzen

Lösungsfamilien in der Diskretisierung (2.27) tritt näherungsbedingt auf und heißt *computational mode*.¹ Die allgemeine Lösung besteht aus der Linearkombination der zwei Lösungsfamilien und die Bedingung der Stabilität lautet $|\xi|^2 = 1$, wenn $c < 1$ ist. Die Größe $c = u\Delta t/\Delta x$ ist die COURANT-Zahl, die Bedingung $c < 1$ nennt man COURANT-FRIEDRICHS-LEVY-, oder CFL-Kriterium, und dieses gilt als notwendige Bedingung der Stabilität.

2. das *upstream* oder *upwind* Verfahren

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + \mathcal{R}(\Delta t) + u \frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} + \mathcal{R}(\Delta x) = 0, \quad (2.28)$$

in dem die erwähnte Approximation mit einseitigen Differenzen erster Ordnung (2.19) geschieht. In der obigen Formulierung gilt (2.28) nur für Bewegungen mit $u = u^+$, wobei $u^+ = u$, wenn $u > 0$. Jedoch kann man unter Verwendung der Bezeichnung $u = u^\pm = (u \pm |u|)/2$ und Vernachlässigung der Angabe der Näherungsordnung allgemein schreiben

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{c}{2}(\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) - \frac{|c|}{2}(\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n). \quad (2.29)$$

Die rechte Seite von (2.29) enthält beide Operatoren, δ_x und δ_{xx} . Die Methode erzeugt also sowohl Phasen- als auch Amplitudenfehler. Der Amplitudenfehler ist zweiter, der Phasenfehler dritter Ordnung. Das Integrationsverfahren verwendet nur ein Zeitintervall, sein Fehler ist zweiter Ordnung, es tritt kein künstlicher Lösungsanteil (*computational mode*) auf, und ξ läßt sich für die Stabilitätsanalyse aus dem Polynom ersten Grades $P(\xi) = \xi + |c|(1 - \cos \kappa\Delta x) + ic \sin \kappa\Delta x - 1$ bestimmen. Die Stabilitätsbedingung lautet $|\xi|^2 \leq 1$, wenn $c < 1$ ist.

In Abb. (2.1) sind numerische Berechnungen als Beleg für die analytischen Erkenntnisse bezüglich (2.27) und (2.29) dargestellt worden. Die Aufgabe bestand in der Skalaradvektion mit konstanter Geschwindigkeit $u(x) = u_0$, die einer COURANT-Zahl von $c = 0.25$ entspricht. In Strömungsrichtung x wurden periodische Randbedingungen angenommen. Auf Grund der Aufgabenstellung soll eine Verschiebung des anfangs vorhandenen Profils von ϕ eine Gebietslänge betragen, weshalb die analytische Lösung mit dem Anfangsfeld nach einem Umlauf überlappt. In Abb. (2.1) wurden deshalb das Anfangsfeld wie auch die analytische Lösung strichliert, die numerische Lösung mit durchgezogener

¹Die Analyse von Haltiner & Williams (1980) zeigt, daß der Lösungsanteil durch den computational mode um so stärker wird, je weniger glatt das Feld von ϕ ist.

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

Linie gezeichnet. Wie die Darstellung zeigt, entwickelt sich die numerische Lösung im Falle des leap-frog Verfahrens (2.27) für beide Anfangsbedingungen stark oszillierend, was auf die Präsenz des computational mode und des Phasenfehlers hindeutet. In der Lösung mit einseitigen finiten Differenzen durch (2.28) überwiegt der Glättungseffekt und die zu advehierenden Felder verflachen in der Weise, daß das Wellenpaket für beide Anfangszustände um seinen Mittelpunkt herum auseinanderfließt.

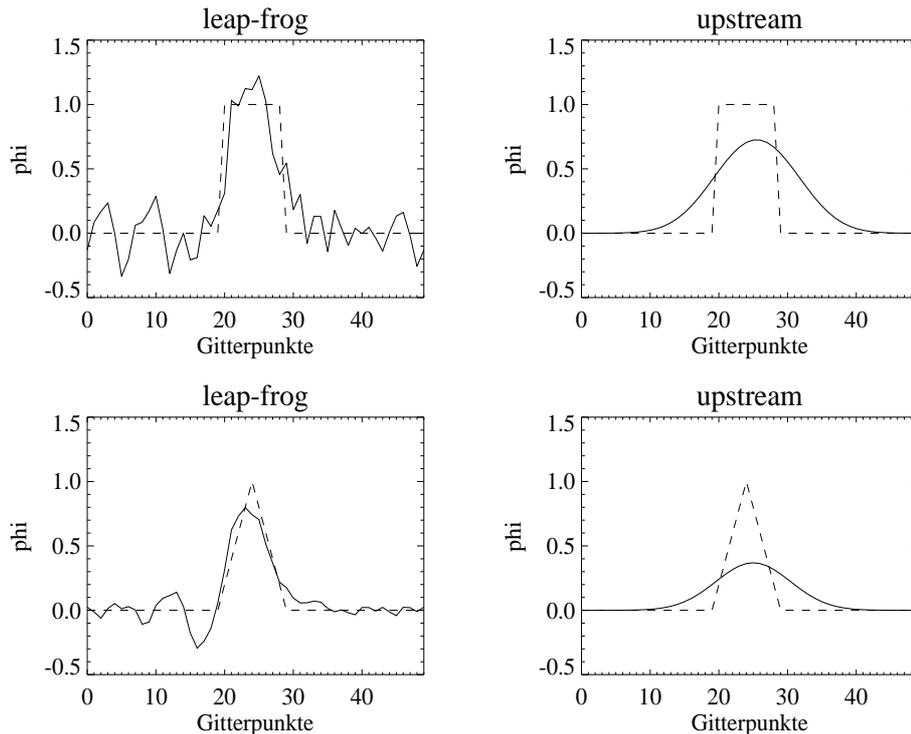


Abbildung 2.1: Ergebnisse eines eindimensionalen Advektionsexperimentes mit dem leap-frog (linke Graphiken) und dem upstream Verfahren (rechte Graphiken), bei einer COURANT-Zahl von $c = 0.25$. Bei periodischen Randbedingungen wurde eine Verlagerung mit konstanter Geschwindigkeit an jedem Gitterpunkt simuliert. Die gestrichelten Linien zeigen die Anfangsbedingungen und analytischen Lösungen, die durchgezogenen Linien das numerische Ergebnis nach dem ersten Umlauf entlang des eindimensionalen Gitters.

Der Vergleich der Methoden (2.27) und (2.28) verdeutlicht, wie wenig die numerische Lösung von sprunghaften Anfangsbedingungen mit der analytischen Lösung übereinstimmt. Da solche positiven Felder bei der Simulation von wolkenphysikalischen Prozessen in hochauflösenden Modellen oder der Ausbreitung von Spurenstoffen bzw. anderen atmosphärischen Beimengungen durchaus entstehen können, ist es von Bedeutung,

die Genauigkeit zu erhöhen. Die Ergebnisse von Schepetkin & McWilliams (1998) belegen jedoch, daß die Erhöhung der Genauigkeit nicht zum Ziel führt, denn sprunghafte Übergänge werden auch dadurch nicht hinreichend genau abgebildet. Dies veranschaulichen auch beide Differenzenoperatoren, δ_x und δ_{xx} , indem sie die Lösungsfunktion für (2.22) als trigonometrische Funktionsreihe interpretieren. Unstetigkeiten lassen sich jedoch mit trigonometrischen Funktionen nur dann ausdrücken, wenn die Funktionsreihe aus unendlich vielen Gliedern besteht, sonst bleibt die Näherung fehlerhaft². Deshalb rückt die Eigenschaft des *shape preserving* oder *monotonicity preserving* von numerischen Advektionsverfahren immer stärker in den Vordergrund. Solche Methoden wurden zunächst von Boris & Book (1973) angeregt und in den Arbeiten von Zalesak (1979), van Leer (1979, 1985) und Colella & Woodward (1984) ausführlich diskutiert. Im Hinblick auf die typischen numerischen Fehler erfordern sie eine numerische Lösung, die frei von Oszillationen und geglätteten Gradienten ist und in diesem Sinne als genau gilt. Dies ist jedoch bei Näherung der Feldverteilung bzw. der Differentialausdrücke nur beschränkt realisierbar. Wie Schepetkin & McWilliams (1998) betonen, kann man solche Advektionsmethoden, die sowohl glättungsfrei als auch nicht oszillierend sind, nicht konstruieren. Laut LeVeque (1992) und Steppeler (persönliche Mitteilung) muß eine gewisse Glättung durch Diskretisierung entweder aus Stabilitätsgründen vorhanden sein, oder deshalb, um bei oszillierenden Verfahren die entstehenden künstlichen Wellen zu unterdrücken.

Zusätzliche Glättung durch numerische Diffusion kann man in verschiedener Weise einführen. Z.B. könnte sie im Wellenraum als schwache, skalenselektive Glättung oder im physikalischen Raum als starke, lokale Glättung wirken. Die Anwendung eines diffusiv wirkenden Operators (z.B. im EM/DM und LM des DWD) filtert nur bestimmte Wellenskalen, wobei die physikalisch richtigen und falschen Wellen nicht auseinandergehalten werden. Starke Diffusion bedarf der Kenntnis der Feldverteilung, um eben nur dort glättend einzugreifen, wo das Profil des zu advehierenden Skalars sich sprunghaft ändert. Lokal glättende Verfahren werden oft unter dem Begriff *flux limiting* zusammengefaßt, obwohl nicht alle dieser Prozeduren ihre Glättungseigenschaft über die Begrenzung der Flüsse entfalten. Neben der angesprochenen Methode der Flußkorrektur (FCT) von Zalesak (1979) gibt es die Begrenzung der abzubildenden Gradienten von van Leer (1979), die Anwendung monotoner Interpolation in verschiedener Weise von Williamson & Rasch (1989), Colella & Woodward (1984), Böttcher (1996), und das sogenannte TVD-Verfahren von Harten (1983) und Sweby (1985).

Zusammenfassend kann man über die Anwendung von Differenzennäherungen feststellen, daß sie mit zwei Typen von numerischen Fehlern verbunden sind, die durch feh-

²Dieser charakteristische Fehler heißt GIBBS-Phänomen.

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

lerhafte Abbildung der Wellenamplituden und der Phasengeschwindigkeiten entstehen. Stetig anwachsende Amplituden verursachen Instabilität, stetig kleiner werdende bedeuten starke Dämpfung der numerischen Lösung. Fehlerhafte Phasengeschwindigkeiten haben numerische Dispersion zu Folge, die sich in der Lösung als hochfrequente Oszillation bemerkbar macht. Nachdem aber dämpfende Näherungen dem Anwachsen von Amplituden entgegenwirken können, besteht auch die Möglichkeit, dispersive Oszillationen mit zusätzlich eingeführter numerischer Viskosität zu unterdrücken. Dies ist besonders unter dem Aspekt wichtig, daß die EULERSchen Gleichungen keine physikalische Viskosität enthalten, die die Entstehung von Oszillation in der Lösung verhindern könnten. Die Praxis zeigt, daß es sogar bei der numerischen Lösung der NAVIER-STOKESSchen Gleichungen von Vorteil ist, den diskreten Gleichungen in kleinem Maße dämpfend wirkende Terme hinzuzuaddieren, um stabile Lösungen zu erzeugen.

2.4 Näherung durch Basisfunktionen (GALERKIN-Methode)

Im Gegensatz zu Finite-Differenzenverfahren verwendet die GALERKIN-Methode keine direkte Approximation der partiellen Ableitung, sondern vielmehr die Darstellung der Funktion durch eine endliche Funktionsreihe

$$\tilde{\phi}(x, t) = \sum_{k=0}^N a_k(t) \nu_k(x), \quad (2.30)$$

in der die unabhängigen Variablen mit Hilfe von Koeffizienten und Basisfunktionen getrennt werden. Nach Substitution von (2.30) in (2.13) erhält man

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right] \tilde{\phi} + \epsilon = 0 \quad \text{mit} \quad \epsilon = \left[\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right] (\phi - \tilde{\phi}). \quad (2.31)$$

Der Fehler ϵ wird dann am kleinsten, wenn er mit der Methode der kleinsten Quadrate zu jeder Basisfunktion orthogonalisiert wird

$$\langle \epsilon, \nu_l \rangle = \int_0^X \epsilon \nu_l dx = 0 \quad \forall l = 1, \dots, N. \quad (2.32)$$

Daraus folgt dann für alle Basisfunktionen ν_l

$$\left\langle \left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) \tilde{\phi}, \nu_l \right\rangle = \sum_{k=0}^N \frac{da_k}{dt} \int_0^X \nu_k \nu_l dx + u \sum_{k=0}^N a_k \int_0^X \frac{d\nu_k}{dx} \nu_l dx = 0. \quad (2.33)$$

Die Auswertung des Integrals in (2.33) und somit auch alle Summanden hängen von den Basisfunktionen ab. In der numerischen Wettervorhersage wurden bislang zwei verschiedene Funktionstypen verwendet, die auch die weitere Einstufung der GALERKIN-Näherung definieren:

2.4. Näherung durch Basisfunktionen (GALERKIN-Methode)

1. Die *spektrale Methode* mit trigonometrischen Basisfunktion. Die erste meteorologische Anwendung fand mit der Lösung der barotropen Vorticitygleichung in sphärischen Koordinaten durch Silberman (1954) und Platzman (1954) statt. Eine wirklich effektive Implementierung hat die Transformationsmethode von Orszag (1970) und Eliassen *et al.* (1970) ermöglicht. Unter allen Näherungsmethoden ist die spektrale Methode am genauesten, wenn die zu nähernde Funktion die Konvergenzbedingung $\lim_{N \rightarrow \infty} (\tilde{\phi} - \phi)^2 = 0$ erfüllt. Im Falle einer glatten ϕ Funktion genügt eine kleinere Untermenge von trigonometrischen Basisfunktionen zu einer hinreichend guten Näherung durch $\tilde{\phi}$, als bei sprunghaften Funktionen, sodaß der Fehler $\phi - \tilde{\phi}$ auf die gleiche Anzahl von Basisfunktionen bezogen bei sprunghaften Funktionen größer ist, als bei glatten Funktionen. Wird die spektrale Methode dennoch auf sprunghafte Funktionen angewandt, machen sich hochfrequente Oszillationen in der spektralen Lösung bemerkbar. Dieser Fehler heißt, wie bei finiten Differenzenverfahren bereits angesprochen, GIBBS-Phänomen. Im Falle diskreter Basisfunktionen $\nu_k(x_j)$ ist noch als Nachteil zu betrachten, daß die Erhöhung der Auflösung den Rechenaufwand pro Gitterpunkt x_j erhöht.
2. Die *Methode der finiten Elemente*, in der lokale Basisfunktionen verwendet werden. Das sind Polynome nullter bis zweiter Ordnung, die nicht zwingend orthogonal sein müssen. Die Auswertung des ersten Integrals in (2.33) führt in diesem Fall zur Lösung einer elliptischen Gleichung für da_k/dt , deren Lösung die Rechenzeit gegenüber finiten Differenzen erhöht. Da aber implizite Zeitintegration, die unter allen Umständen stabil ist, ebenfalls zu einer elliptischen Gleichung führt, kann man mit dem gleichen Rechenaufwand das Stabilitätsverhalten der Lösung verbessern. Die Erhöhung der Genauigkeit geschieht entweder mittels Basisfunktionen höherer Ordnung, oder durch Verfeinerung des Gitters. Beide sind mit zusätzlichem Rechenaufwand verbunden, wobei laut Steppeler (1987) die Lösung mit quadratischen statt linearen Elementen ähnlich viel Rechenzeit benötigt und die Genauigkeit mit der der spektralen Methode vergleichbar ist. Der herausragende Vorteil der finiten Elemente ist ihre frei wählbare Form und Verteilung. Die Elemente können ohne Einschränkung klein oder groß sein und beliebig plaziert werden, je nachdem ob in bestimmten Bereichen des Vorhersagegebietes eine höhere oder weniger hohe Auflösung notwendig ist. Durch die dem Rand angepassten Elemente können sogar die Randbedingungen sehr genau formuliert werden. Der Nachteil der finiten Elemente liegt in der Komplexität einer nicht regelmäßigen Elementverteilung. Die Kodierung eines solchen Programmes mit Elementen ungleicher Form und Verteilung gestaltet sich schwierig und der Rechenaufwand steigt wesentlich an. Laut

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

Giraldo (1997) bekommt man aber für nahezu gleichmäßige Elemente sehr genaue und effektive Verfahren.

2.5 Diskretisierung mit finiten Volumina

In diesem Unterkapitel handelt es sich um eine Übersicht über die *Methode der finiten Volumina*, die in der numerischen Berechnung fluiddynamischer Probleme immer häufiger angewandt wird. Der Grund dafür ist vor allem die Erhaltungseigenschaft der Methode, die sich aus der Herleitung der Bilanzgleichungen ergibt und nicht durch Zwangsbedingungen gesichert wird. Andererseits ist die Methode unabhängig von der Gitterstruktur und der Geometrie des Raumes, solange die Gitterintervalle aus Polygonen bestehen. Anhand dieser Polygone läßt sich das Flächenintegral in (2.2) wie folgt umformen

$$\int_{\partial V} \varrho_n \mathbf{v}_n \cdot \mathbf{n} \, df = \sum_s \mathbf{n}_s \cdot \int_{F_s} \varrho_n \mathbf{v}_n \, df_s, \quad (2.34)$$

wobei mit s die Polygone bezeichnet werden. Das erste Volumenintegral in (2.2) wird unter der Annahme eines zeitlich konstanten Gitters³ und der Mittelbildung

$$\bar{\varrho}_n = \frac{1}{\Delta V} \int_V \varrho_n \, dV, \quad (2.35)$$

vereinfacht dargestellt als

$$\int_V \frac{\partial \varrho_n}{\partial t} \, dV = \Delta V \frac{d\bar{\varrho}_n}{dt}. \quad (2.36)$$

Schließlich erhält man mit

$$\Delta V \frac{d\bar{\varrho}_n}{dt} + \sum_s \mathbf{n}_s \cdot \int_{F_s} \varrho_n \mathbf{v}_n \, df_s = 0 \quad (2.37)$$

ein sehr genaues Berechnungsverfahren, wenn ϱ_n in der Form von (möglichst monotonen) Polynomen höheren Grades vorhanden ist und \mathbf{v}_n in hinreichend guter Näherung bekannt ist.

In der numerischen Wettervorhersage werden die prognostischen Gleichungen zunehmend nach dem Prinzip der finiten Volumina diskretisiert. Im Globalmodell des Deutschen Wetterdienstes, GME, verwendet man z.B. sechseckige Polygone als Horizontaldiskretisierung, wobei die Elemente aus jeweils fünf Rhomben entlang der beiden Halbkugeln des Erdballs durch Teilung der Seiten zustande kommen. Der Vorteil einer solchen

³Das bedeutet zeitlich konstante Polygone und von der Zeit unabhängige Integrationsgrenzen.

2.6. Semi-Lagrangesche Methoden

Diskretisierung liegt darin, daß die Elementenflächen näherungsweise gleichmäßig sind und deshalb nicht der Singularität unterliegen, die durch Meridiankonvergenz an den Erdpolen verursacht wird und das CFL-Kriterium drastisch verschärft.

Die Bedeutung der hexagonalen Gitterstruktur wurde bereits von Sadourney *et al.* (1968) erkannt, ihre Lösungsprozedur war jedoch nicht praktikabel. Die erste erfolgreiche Implementierung in einem Wettervorhersagemodell durch Steppeler & Prohl (1996) entstand auf Grund der Erkenntnisse von Baumgardner & Frederickson (1985). Weitere Untersuchungen und Ergebnisse über verschiedene sphärische Diskretisierungsmethoden findet man bei Purser (1998).

Ein eindimensionales Beispiel für (2.37) ist in Abb. (2.2) dargestellt. Die Graphik zeigt die Änderung der Masse ϱ_n im Gitterintervall $[x_j, x_{j+1}]$. Am linken Rand des Intervalls fließt Masse aus dem Teilintervall $[x_L, x_j]$ zu, am rechten Rand geht der Anteil $[x_R, x_{j+1}]$ an $[x_{j+1}, x_{j+2}]$ verloren. Die neue Bilanz für ϱ_n in $\Delta x = [x_j, x_{j+1}]$ lautet

$$\Delta x \bar{\varrho}_n = \int_{x_j}^{x_{j+1}} \varrho_n dx + \int_{x_L}^{x_j} \varrho_n dx - \int_{x_R}^{x_{j+1}} \varrho_n dx, \quad (2.38)$$

die exakt mit dem Ergebnis übereinstimmt, welches aus der aufeinanderfolgenden Integration von (2.8) nach x und t unter Berücksichtigung von $x_L = x_j - u(x_L)t$ bzw. $x_R = x_{j+1} - u(x_R)t$ resultiert. Für die Advektionsgeschwindigkeiten $u(x_L)$ und $u(x_R)$ gilt in nullter Näherung $u(x_L) = u_j$ und $u(x_R) = u_{j+1}$. Eine genauere Näherung dieser Geschwindigkeiten erfordert die Berechnung von *Trajektorien*. Die Kenntnis solcher Trajektorien ist die Grundvoraussetzung der Lagrangeschen Integrationsmethoden, die im nächsten Unterkapitel betrachtet werden.

2.6 Semi-Lagrangesche Methoden

In den vorangehenden Unterkapiteln wurde erläutert, wie die Genauigkeit der numerischen Berechnungen von (2.13) von der Näherung des Advektionstermes $u(\partial\phi/\partial x)$ abhängt. Es wurde darauf hingewiesen und mit den Ergebnissen von Schepetkin & McWilliams (1998) belegt, daß auch dann hochfrequente Oszillationen auftreten, wenn die Näherungsordnung erhöht wird.

Die Schwierigkeit der Näherung des Advektionstermes läßt sich umgehen, wenn statt der partiellen Ableitungen in (2.13) die totale Feldableitung in der mit (2.13) identischen Form

$$\frac{d\phi}{dt} = 0 \quad (2.39)$$

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

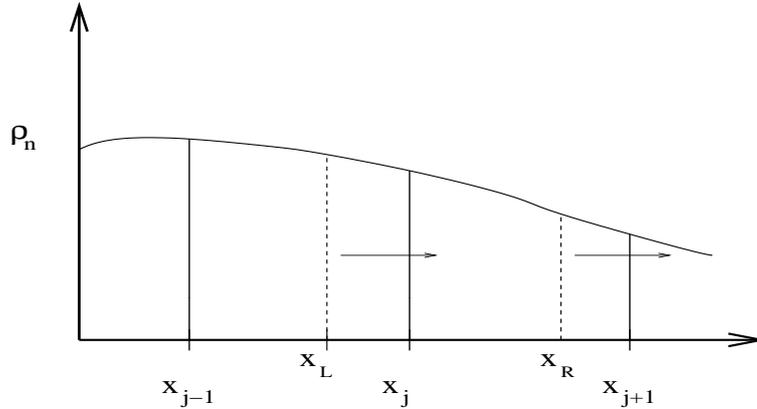


Abbildung 2.2: Die eindimensionale Darstellung des Flusses von ρ_n in positiver Richtung.

mit Hilfe von Näherungsmethoden gelöst wird.

Die Voraussetzung der Lösung von (2.39) ist die genaue Kenntnis der Trajektorien. In Abb. 2.3 ist die Kurvenfunktion der Trajektorie $x(t)$ in Raum-Zeit-Koordinaten dargestellt. Daran ist abzulesen, daß für die Verschiebung $\alpha = X(x(t), t_0) - X(x(t_0), t_0) = X(x(t), t) - X(x(t_0), t)$ gilt und deshalb statt $X(x(t), t)$ der Punkt $X(x(t), t_0)$ bestimmt werden kann. Dazu ist entweder die Differentialgleichung

$$\frac{\partial X}{\partial t} = u[X(x(t), t_0), t] \quad (2.40)$$

oder die Integralgleichung

$$X(x(t), t_0) = X(x(t_0), t_0) + \int_{t_0}^t u[X(x(\tau), t_0), \tau] d\tau \quad (2.41)$$

zu lösen und für die Advektion der Zusammenhang $\phi[X(x(t), t), t] = \phi[X(x(t_0), t), t_0]$ zu berücksichtigen. In den Übersichtsartikeln von McDonald (1998) und Staniforth & Côté (1998) wird vereinfacht die Schreibweise $x(t)$ für $X(x(t), t_0)$ und $x(t_0)$ für $X(x(t_0), t_0)$ verwendet und damit die Lösung als $\phi(x(t), t) = \phi(x(t_0), t_0)$ ausgedrückt.

In einer solchen Lösungsprozedur können im Gegensatz zu (2.27), (2.28) oder zur GALERKIN-Näherung keine Näherungsfehler auftreten, weil für $\partial/\partial x$ keine Näherung benötigt wird. Leider bleiben die Luftpartikeln in einer rein Lagrangeschen Simulation wegen Konvergenz bzw. Divergenz im Geschwindigkeitsfeld im allgemeinen nicht gleichmäßig verteilt, sodaß die Punkte (Luftpartikeln, -pakete), an denen die Zustandsgrößen der Flüssigkeit zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannt sind, das Vorhersagegebiet ungleichmäßig abdecken. Für die numerische Wettervorhersage eignet sich eine

2.6. Semi-Lagrangesche Methoden

solche Lösungsmethode weniger gut, denn dort wird eine gleichmäßige Datendichte im Vorhersagegebiet angestrebt, während die Verschiebung der Lagrangeschen Integration zufolge insbesondere auch zwischen den Gitterpunkten liegen kann.

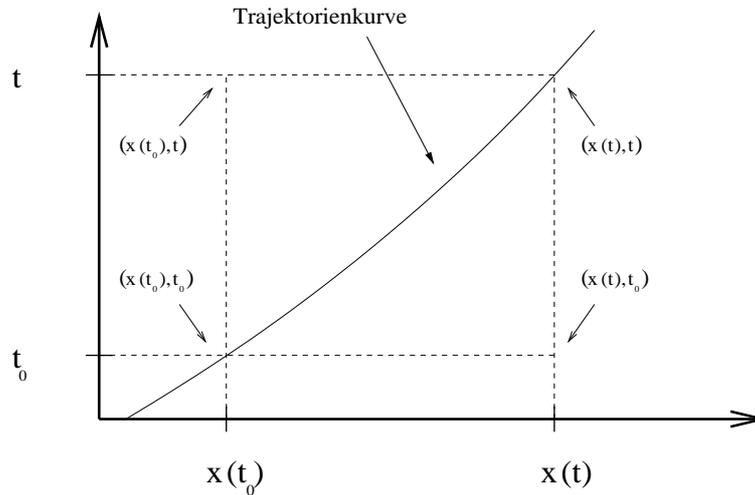


Abbildung 2.3: Die Kurvenfunktion einer Trajektorie, die zum Zeitpunkt t_0 den Punkt $x(t_0)$ passiert und zum Zeitpunkt t den Punkt $x(t)$ erreicht.

Mit der Zielsetzung, die Advektion dennoch auf einem zeitlich konstanten Gitter mit Trajektorienberechnungen zu simulieren, wurde die *interpolierende Lagrangesche* Vorgehensweise eingeführt. Darunter versteht man ein Verfahren, welches die Advektion nach dem Lagrangeschen Prinzip berechnet, aber Feldwerte nach jedem Rechenschritt von den vermutlich unregelmäßig verteilten Endpunkten des Verschiebungsvektors auf das regelmäßige und zeitlich konstante Gitter projiziert bzw. interpoliert. Wie die Abb. 2.4 zeigt, kann der Verschiebungsvektor entlang einer Trajektorie

1. entweder zeitlich vorwärts gerichtet berechnet werden, wobei der Anfangspunkt der Trajektorie am Gitterpunkt liegt während sich der Endpunkt nach einem Zeitschritt im allgemeinen zwischen den Gitterpunkten befindet. Die Aufgabe der Interpolation oder Projektion ist es, das Feld von den Endpunkten wieder auf die Gitterpunkte zu übertragen, um dort weitere Rechnungen durchführen zu können.
2. oder rückwärts gerichtet berechnet werden. Damit stellt sich die umgekehrte Situation ein, das heißt, der Endpunkt der Trajektorie liegt am Gitterpunkt und der Anfangspunkt gemäß dem rückwärts gerichteten Verschiebungsvektor zwischen den Gitterpunkten. Die Aufgabe der Projektion bzw. Interpolation lautet diesmal, das

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

Feld mit Hilfe der benachbarten Gitterpunkte um den Anfangspunkt der Trajektorie herum zu berechnen.⁴

Mit Hilfe der interpolierenden (projizierenden) Übertragung des Feldes läßt sich die Lagrangesche Lösung von (2.39) in Gitterpunktsmodellen so anwenden, daß alle anderen Prozesse der Modellphysik auf dem zeitlich konstanten Gitter lokal berechnet werden. Diese Vorgehensweise nennt sich *semi-Lagrangesche* Integration der fluiddynamischen Gleichungen und ist bei Staniforth & Côté (1991) beschrieben.

Die Entwicklung interpolierender semi-Lagrangescher Advektionsmethoden wurde von Wiin-Nielsen (1959) und Robert (1981, 1982) initiiert und unter anderem durch McDonald (1986), Temperton & Staniforth (1987) und Bates *et al.* (1990) vorangetrieben. Bis Anfang der 90er Jahre verwendete man ausschließlich Rückwärtstrajektorien, weil die Berechnung des Advektionsschrittes einer Interpolation zwischen gleichmäßig verteilten Stützpunkten bedarf. Dies ist einfacher durchzuführen, als zwischen nicht gleichmäßig verteilten Stützpunkten zu interpolieren, was im Falle von Vorwärtstrajektorien notwendig ist. Der Verschiebungsvektor $\alpha_j = x_j - x(t)$ einer Rückwärtstrajektorie am Gitterpunkt

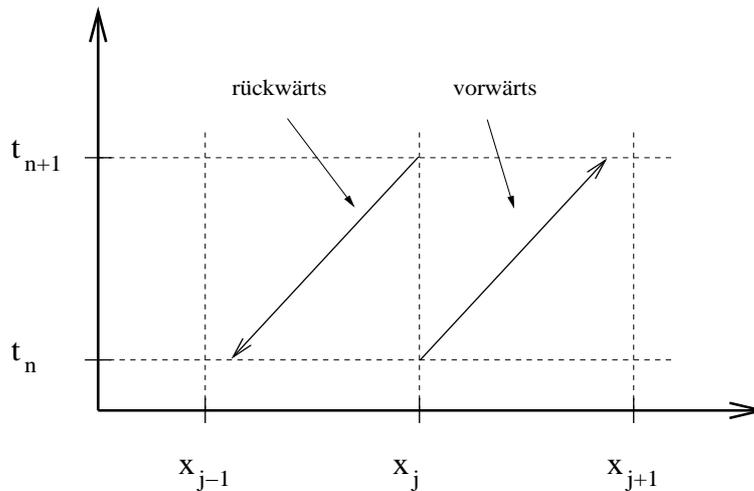


Abbildung 2.4: Die Verschiebungsvektoren α für Vorwärts- und Rückwärtstrajektorien.

j wird wie folgt bestimmt

$$\alpha_j = \Delta t \cdot u(x_j - \alpha_j/2, t_n + \Delta t/2), \quad (2.42)$$

wobei $u(x)$ entlang des Integrationspfades von (2.41) nicht bekannt ist und deshalb am Mittelpunkt der Trajektorie näherungsweise berücksichtigt wird. α_j resultiert dann durch

⁴Dies ist der Endpunkt des rückwärts gerichteten Verschiebungsvektors.

2.6. Semi-Lagrangesche Methoden

iterative Lösung der obigen transzendenten Gleichung. Unter der Voraussetzung, daß die Näherung von u zwischen den Gitterpunkten hinreichend genau ist und mit $\alpha_j^{(0)} = \Delta t \cdot u(x_j, t_n + \Delta t/2)$ eine hinreichende nullte Näherung für α_j zur Verfügung steht, lautet die Lösung im m -ten Iterationsschritt

$$\alpha_j^{(m+1)} = \Delta t \cdot u(x_j - \alpha_j^{(m)}/2, t_n + \Delta t/2). \quad (2.43)$$

Bates & McDonald (1982), McDonald & J.R.Bates (1987), Temperton & Staniforth (1987) und Seibert & Morariu (1991) haben eine Reihe von Varianten zur Bestimmung von $u(x_j, t_n + \Delta t/2)$ untersucht und gezeigt, wie sich die Berechnung des Startpunktes auf die Genauigkeit der Ergebnisse auswirkt. Temperton & Staniforth (1987) haben diesbezüglich die Rotation starrer Körper als Testproblem betrachtet und dabei einerseits festgestellt, daß solche Verfahren, die den Rotationsanteil des Windes genauer wiedergeben, für allgemeine Probleme besser geeignet sind. Zusätzlich fanden sie heraus, daß eine zeitliche Extrapolation an Gitterpunkten genauere Ergebnisse liefert, als entlang der Trajektorien, worauf auch bei Staniforth & Côté (1998) und McDonald (1998) hingewiesen wird. Zweitens wurde an den Resultaten beobachtet, daß in großskaligen Modellen, bzw. in Modellen der meso- α und meso- β Skala (z.B. EM/DM des DWD) eine räumlich lineare Interpolation für die Berechnung der Geschwindigkeit zwischen den Gitterpunkten gemäß $u(x_j - \alpha_j^{(m)}/2, t_n + \Delta t/2)$ hinreichend genau ist⁵.

Der Rechenschritt von Interpolation bzw. Projektion findet in fast allen Anwendungen mit dem LAGRANGESchen Interpolationspolynom dritter Ordnung statt, welches nach Bartello & Thomas (1996) seine Genauigkeit mit einem vertretbaren Maß an Rechenaufwand erreicht. Die Genauigkeit semi-Lagrangescher Methoden ist vergleichbar mit der von Eulerschen Verfahren. Wie die Analyse von McDonald (1984, 1987) zeigt, verursacht die LAGRANGESche Interpolation dritter Ordnung weniger Dispersion und Dämpfung, als z.B. (2.27) und (2.28), obwohl die Interpolation mit Polynomen höherer Ordnung auf kleineren Skalen glättend wirkt. Dispersion und Glättung entstehen bei Interpolationspolynomen in erster Linie dann, wenn sie als Summe und Produkt von finiten Differenzen gebildet werden und als Differenzenoperator Phasen- und Amplitudenfehler erzeugen.

Die Vorteile von semi-Lagrangeschen Verfahren kommen laut Olim (1994) beim Vergleich mit Eulerschen Differenzenmethoden deshalb zum Tragen, weil das Stabilitätskriterium der Lagrangeschen Integration, im Gegensatz zu Eulerschen Verfahren, von der Varianz und nicht der Magnitude der Geschwindigkeit abhängt. Dadurch ist ein längerer Zeitschritt möglich, als bei Eulerschen Verfahren wegen des CFL-Kriteriums erlaubt ist.

⁵Zur Modellierung aufsteigender Cumuli konnte die interpolierende semi-Lagrangesche Methode in der geschilderten Weise ebenfalls erfolgreich angewendet werden (Pellerin *et al.*, 1995).

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

Die höhere Effizienz wird jedoch nicht mehr gewährleistet, wenn das advehierende Windfeld nicht glatt genug ist. In diesem Fall ist genauigkeitsbedingt nur ein kürzerer Zeitschritt erlaubt, und die pro Zeitschritt notwendige, höhere Rechenintensität führt zu einer längeren Laufzeit. Solche rauhen Windfelder herrschen vor allem auf der kleinen Skala, in bodennahen Luftschichten von Gebirgsregionen. Dies bestätigen Vergleichsexperimente mit dem Eulerschen Lokal-Modell des DWD und dem semi-Lagrangeschen Modell MC2 des Kanadischen Wetterdienstes. Mit dem MC2 konnte auf einem Horizontalgitter $\Delta x \approx 3$ km (im Gegensatz zu LM mit $\Delta x \approx 7$ km), bei einer COURANT-Zahl $c \approx 1$ und einer deutlich gröber aufgelösten Orographie $\Delta x \approx 10$ km keine ähnlich detailreiche Struktur der Temperaturverteilung in Gebirgstälern erzielt werden, wie mit dem Lokal Modell. Diesen experimentellen Befund unterstreicht theoretisch die Analyse von Hérelil & Laprise (1996). In ihrer Untersuchung stationärer Schwerewellen orographischen Ursprungs im semi-Lagrangeschen Modell MC2 auf der unteren meso- γ Skala benötigen sie für den kritischen Bereich konvergenter Lösungen mit semi-impliziten Zeitschemata COURANT-Zahlen kleiner als eins. Darüber hinaus tritt jenes Oszillationsphänomen bei MC2-Simulationen auf, dessen Entstehung bereits in hydrostatischen mesoskaligen Modellen beobachtet und unter anderem von Rivest *et al.* (1994) und Côté *et al.* (1995) geklärt wurde.

Interpolierende semi-Lagrangesche Advektionsmethoden mit Vorwärtstrajektorien sind entweder mit der *Kaskadeninterpolation* (die Interpolation erfolgt nacheinander, in jeder Richtung eindimensional) von Purser & Leslie (1991a), Purser & Leslie (1994) oder mit der Prozedur von Sun & Yeh (1997) realisierbar. Die Kaskadeninterpolation wurde eingeführt, um die Feldwerte von einem Lagrangeschen, nicht gleichmäßigen Gitter, welches durch die Verbindung der Endpunkte von Vorwärtstrajektorien entsteht, auf das feste (Eulersche) Rechengitter zu übertragen. In den Arbeiten von Leslie & Purser (1995) und Rancic (1994) wurden zum Zwecke der Interpolation eindimensionale massenerhaltende Projektionen verwendet und gezeigt, daß durch diese Modifikation die Massenerhaltung der gesamten Abbildung gewährleistet werden kann. Die Kaskadeninterpolation wurde von Nair *et al.* (1999) im Hinblick auf Effizienz und Genauigkeit auch im Vergleich zur Prozedur von Sun & Yeh (1997) verbessert, welche die Interpolation auf dem gleichen Lagrangeschen Gitter ausführt, jedoch mit zweidimensionalen Polynomen. Dabei werden die Kriterien von Sun *et al.* (1996) verwendet, um künstliche Überschüsse zu vermeiden.

Ebenfalls unter Lagrangeschen Integrationsmethoden ist die Lösung der Gleichung

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \varrho_n dV = 0 \quad (2.44)$$

zu erwähnen. Lin & Rood (1997) nennen die numerische Berechnung von (2.44) *flux-*

2.6. Semi-Lagrangische Methoden

form *semi-Lagrangian method*, Laprise & Plante (1995) verwenden dafür den Begriff *semi-Lagrangian integrated-mass method*. Diese Bezeichnungen sind einerseits eine anschauliche Erklärung für (2.44), daß nämlich die Masse innerhalb der Integrationsgrenzen auch dann konstant bleibt, wenn jene Grenzen sich zeitlich bewegen. Andererseits versuchen sie die Ähnlichkeit zwischen (2.44) und (2.8) dahingehend auszudrücken, daß in beiden Fällen die Massenverteilung $\varrho_n(x)$ in einem Intervall Δx durch verschiedene Polynome bekannt sein muß, um daraus den Fluß an den Intervallgrenzen zu bestimmen. Wie die Abb. (2.5) und (2.6) zeigen, sind dazu sowohl Rückwärts- als auch Vorwärtstrajektorien geeignet. Bei Rückwärtstrajektorien wird die Masse ϱ_n aus den Teilintervallen $[x_L, x_j]$ bzw. $[x_j, x_R]$ zusammengeführt, während bei Vorwärtstrajektorien die Masse des Gitterintervalls $\Delta x = [x_j, x_{j+1}]$ in $[x_L, x_j]$ bzw. $[x_j, x_R]$ verteilt wird.

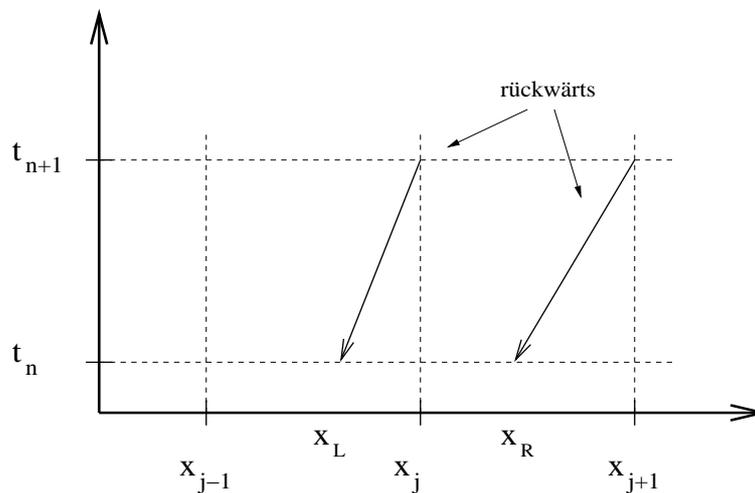


Abbildung 2.5: Die Verschiebungsvektoren α wenn die Lösung von (2.44) mit Rückwärtstrajektorien geschieht.

Solche Methoden sind massenerhaltend und bei monotoner Anfangsverteilung von ϱ_n auch monoton und deshalb zur Berechnung von Flüssen auch dann gut geeignet, wenn das Skalarfeld steile Strukturen hat. In der meteorologischen und ozeanographischen Modellierung kamen sie im Gegensatz zu den Ingenieurwissenschaften und der Astrophysik wegen der oft verwendeten hydrostatischen Näherung bislang selten zum Einsatz. Hydrostatische Modelle beschreiben hauptsächlich die Entwicklung großskaliger, glatter Felder, für deren Simulation herkömmliche Diskretisierungsansätze als hinreichend erschienen, zumal die Methoden von van Leer (1979) und Colella & Woodward (1984) dazu neigen, sogar flache Übergänge von $\varrho_n(x)$ aufzusteilen. Die Untersuchung der Flußform-Verfahren für meteorologische Anwendungen wurde in erster Linie von

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

den immer höher aufgelösten wolkenphysikalischen Prozessen der kleinskaligen Modelle ebenso motiviert, wie von den Modellen zur Spurenstoffausbreitung, in denen Konzentrationsgrößen, wie Wolkenwasser oder verschiedene andere atmosphärische Beimengungen mit großen räumlichen Gradienten behandelt werden.

Die ersten 'Flußform'-semi-Lagrangeschen Verfahren von Carpenter *et al.* (1990) und Lin *et al.* (1994) waren eindimensionale, monotone, massenerhaltende Methoden. Sie hatten den Nachteil, daß sie mehrdimensional nur nach dem Prinzip der mehrfachen, aufeinanderfolgenden eindimensionalen Operation (operator splitting) benutzt werden konnten. Der wichtigste Grund dafür, daß diese Verfahren keine breite Anwendung gefunden haben, liegt wahrscheinlich am numerischen Fehler des splitting, welcher in mehrdimensionalen Problemen proportional zum Zeitschritt ist. Die ersten mehrdimensionalen Flußform semi-Lagrangeschen Lösungen stammten von Laprise & Plante (1995) und Machenhauer & Olk (1995). Lin & Rood (1996) und Lin & Rood (1997) entwickelten eine mehrdimensionale Erweiterung früherer eindimensionaler Verfahren, die, ähnlich zu van Leer (1979) und Colella & Woodward (1984), ebenfalls massenerhaltend ist.

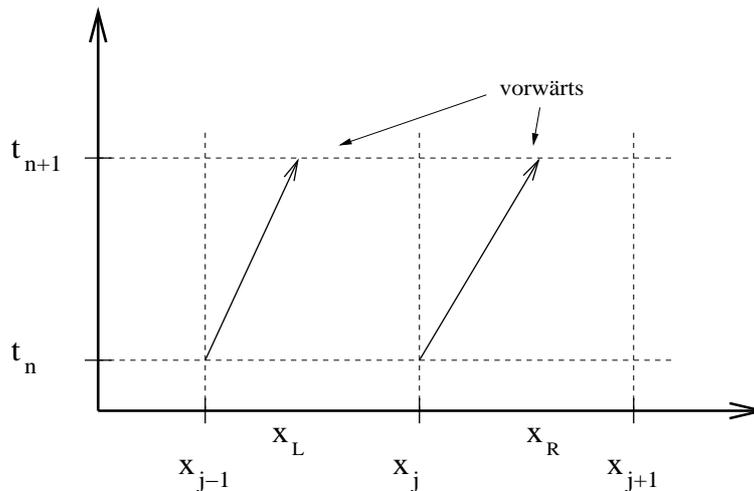


Abbildung 2.6: Die Verschiebungsvektoren α , wenn die Lösung von (2.44) mit Vorwärtstrajektorien geschieht.

Zum Abschluß dieser Übersicht über numerische Verfahren zur Simulation von Advektionsprozessen wird auf die Partikel-Methode hingewiesen. Sie wird in dieser Arbeit angewandt und erweitert und im nächsten Kapitel ausführlich erläutert. Im Rahmen der Übersicht soll die Methode hier noch kurz skizziert werden.

In verschiedenen verwandten Disziplinen der hydrodynamischen Modellierung wurde die Partikel-Methode verwendet, z.B. zur Simulation von plasmaphysikalischen und

2.6. Semi-Lagrangesche Methoden

molekulardynamischen Problemen durch Hockney & Eastwood (1981), von chemischen Reaktionen durch O'Rourke *et al.* (1993) und Konvektions-Diffusionsrechnungen durch Fogelson (1992). Die Partikel-Methode zur Modellierung der atmosphärischen Advektion durch Steppeler (1990a) stellt einen neuen Aspekt bezüglich Lagrangescher Verfahren dar. Steppeler (1990a) betrachtet Luftpakete von endlich großer Ausdehnung. Sie verlagern sich entlang der Trajektorien zeitlich vorwärts und transportieren den passiven Skalar an immer neue Orte. Die einzige Näherung, die dabei verwendet wird, ist die iterative Bestimmung der räumlichen Verschiebung, die, wie (2.43) bei den Rückwärtstrajektorien, nur mit positivem Vorzeichen geschieht. Das physikalische Feld wird dabei nicht abgebildet, das heißt die Lösung des Advektionsproblems erfolgt ohne Verlust an Genauigkeit. Auch entstehen keine Phasen- oder Amplitudenfehler, die sich als Überschüsse bei Sprungfunktionen bemerkbar machen. Der Nachteil dieses Verfahrens liegt in der aufwendigen Verwaltung der sich zeitlich vorwärts bewegenden Lagrangeschen Punkte. Steppeler & Ország (1995) untersuchten die Anwendbarkeit der Partikel-Methode sowohl auf die passive Advektion, als auch auf das Flachwasser-System. Sie haben zusätzlich zu den Erkenntnissen über die passive Advektion festgestellt, daß eine sich über das Vorhersagegebiet verlagernde balancierte Störung ohne Näherungsfehler beschrieben wird. Die stationäre Trägheitswelle infolge der konstanten Überströmung eines Berges wird bei der kleinskaligen Orographie im Vergleich zur analytischen stationären Lösung mit einem Überschuß dargestellt. Im Falle der breiter angelegten idealisierten Orographie in Form einer GAUSSschen Verteilungsfunktion hingegen überquert eine balancierte Störung das Vorhersagegebiet, ohne ihre Gestalt zu verändern. Als Konsequenz der Überschüsse wurde zum einen darauf hingewiesen, daß aus Gründen der Praktikabilität eine andere Vorgehensweise zur Übertragung der Feldwerte von den Lagrangeschen, beweglichen auf die Eulerschen, festen Gitterpunkte notwendig ist (Steppeler & Prohl, 1996). Als zweites hat man erkannt, daß die Methode der beweglichen Partikel sich in erster Linie für die Simulation der Advektion passiver Größen, wie der Konzentration von Wasserdampf und Wolkenwasser oder anderer atmosphärischer Beimengungen eignet. Das Einbeziehen der Komponenten der Geschwindigkeit erfordert weiteren numerischen Aufwand.

2. Das Problem der Modellierung der Advektion

3

DIE NICHT-INTERPOLIERENDE METHODE – DARGESTELLT ANHAND EINES BAROTROPEN FLACHWASSERMODELLS

In diesem Kapitel wird das in der meteorologischen Anwendung neue Advektionsverfahren, die *Partikel- oder nicht-interpolierende Lagrangesche Methode*, dargestellt. Mit dieser Methode wird die Modelldynamik eines Flachwassers berechnet.

Obwohl die Modellannahmen die Gültigkeit der Ergebnisse einschränken, sind derartige Modellstudien vorteilhaft, weil die Modelldynamik, genauso wie im Falle der ursprünglichen NAVIER-STOKESSchen Gleichungen, sich aus der Wechselwirkung zweier unterschiedlich verlaufender Eigenlösungen zusammensetzt.

Wie Beobachtungen und analytische Untersuchungen zeigen, bestimmen größtenteils die langsameren Prozesse die Wetterentwicklung bzw. das längerfristige Verhalten der Atmosphäre, während die schnelleren praktisch bedeutungslos bleiben. Man bezeichnet deshalb die Eigenlösung, die eine kürzere charakteristische Zeit besitzt, als Lärmprozeß. Die meteorologisch relevante Eigenlösung mit der längeren charakteristischen Zeit von einigen Tagen wird ROSSBY-Prozeß genannt.

Zunächst wird das eindimensionale Modell eingeführt. Dem folgt die Berechnung der passiven, von der Geschwindigkeit entkoppelten Advektion einer materiellen Erhaltungsgröße mit der nicht-interpolierenden Methode, sowie die Anwendung dieses Verfahrens auf das eindimensionale Flachwassersystem, wobei zwei verschiedene Anfangsbedingungen gewählt werden. Zu beiden Anfangsbedingungen gehört eine solche Anfangswert-Aufgabe, deren Lösung analytisch reproduzierbar und daher mit der numerischen vergleichbar ist. Mit dem lärmbehafteten Anfangszustand wird die Überströmung eines idealisierten Hindernisses simuliert und die Ähnlichkeit des stationären Zustandes mit der stationären analytischen Lösung verglichen¹.

Die Modelldynamik unter lärmfreien Anfangsbedingungen wird deshalb berechnet, weil die Zustandsänderung nur vom ROSSBY-Prozess gesteuert wird, und dies wegen der speziellen Annahmen für alle Modellvariablen geschlossen als lineare Wellenlösung

¹Der lärmfreie Anfangszustand ist notwendige Bedingung einer lärmfreien Lösung und wird auch in baroklinen Vorhersagemodellen über verschiedene Initialisierungsverfahren angestrebt (Herbert, 1980; Temperton, 1988).

3. Die nicht-interpolierende Methode

zu formulieren ist. Folglich kann man auch unter solchen Anfangsbedingungen die numerische Lösung mit der vorhandenen analytischen vergleichen und auf die Güte und Anwendbarkeit der Methode schließen.

3.1 Das barotrope Modell

Das barotrope 3-Variablen-Flachwassersystem beinhaltet die spezielle Bedingung, daß die Massendichte konstant ist. Dieses System dient als Gleichungsbasis für die zonalen und meridionalen Windgeschwindigkeiten U und V , sowie für das Geopotential der barotropen Modellhöhe, $H = g \cdot h$, bzw. der Orographiehöhe, $Z = g \cdot z$, mit $g = 9.81 \text{m/s}^2$. Die Modellgleichungen lauten

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} &= fV - \frac{\partial H}{\partial x} \\ \frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} &= -fU - \frac{\partial H}{\partial y} \\ \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[U(H - Z)] + \frac{\partial}{\partial y}[V(H - Z)] &= 0.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Das eindimensionale Modell läßt sich z.B. nach Edelmann (1972) oder nach Steppeler (1990b) herleiten. Dabei gelten die Annahmen $f = f_0 = \text{konst}$, $U = U(x, t)$, $V = V(x, t)$; außerdem wird die vertikale Mächtigkeit des homogenen Mediums als von y unabhängig angenommen und dementsprechend $H = H(x, t) - f_0 U_0 y$, sowie $Z = Z(x) - f_0 U_0 y$ (mit $U_0 = \text{der konstante Grundstrom}$) gesetzt. Mit diesen Einschränkungen geht (3.1) in folgende eindimensionale Formulierung über

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} &= f_0 V - \frac{\partial H}{\partial x} \\ \frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} &= -f_0 (U - U_0) \\ \frac{\partial H}{\partial t} + U \frac{\partial H}{\partial x} &= -(H - Z) \frac{\partial U}{\partial x} + U \frac{\partial Z}{\partial x},\end{aligned}\tag{3.2}$$

wobei $f_0 U_0 = -(\partial H / \partial y)_0$ (geostrophischer Grundstrom).

3.2 Passive Advektion mit konstanter Geschwindigkeit in einer Dimension

Die Grundidee des nicht-interpolierenden, Partikel-Lagrangeschen Verfahrens von Steppeler (1990a) greift auf die Lagrangesche Beschreibung einer strömenden Flüssigkeit

3.2. Passive Advektion mit konstanter Geschwindigkeit in einer Dimension

zurück, die im Unterkapitel 2.6 erörtert wurde. Zwecks Darstellung der nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Methode sei jetzt angenommen, daß die Strömung in einer Raumdimension stattfindet. Darüber hinaus definiere man in diesem eindimensionalen Raum zwei unterschiedliche Gitterstrukturen. Das sind das zeitlich konstante Eulersche Gitter \tilde{X} , das zu Beginn der Berechnung festgelegt wird und das Lagrangesche Gitter \hat{X} , dessen Punkte von Zeitpunkt zu Zeitpunkt immer an den Ort gesetzt werden, an dem sich die Trajektorien augenblicklich befinden.

Die Verteilung der Eulerschen und Lagrangeschen Gitterpunkte kann zum Anfangszeitpunkt, je nach Anwendung, nach verschiedenen Gesichtspunkten gewählt werden. Diesmal gelte für das Eulersche Gitter $\tilde{X} = \{x_i : x_i = i \cdot \Delta x\}$, für das Lagrangesche Gitter $\hat{X}(t = 0) = \tilde{X}$.

Eine solche bewegliche Gitterstruktur erlaubt die direkte Simulation der passiven Advektion, indem die Lagrange-Punkte sich zeitlich vorwärts entlang der Flußtrajektorien verlagern und dabei die Amplitude behalten, die ihnen zu Beginn der Simulation zugeordnet wurde. Die beweglichen Gitterpunkte und die Amplituden definieren die Partikel $\{\hat{X}_j, \hat{\phi}_j\}$, die das Feld mit den *Numerierungskoordinaten* j im Lagrangeschen Sinne repräsentieren.

Im Partikelmodell soll außer der Berechnung der Trajektorien lediglich die Verteilung der Lagrangeschen Punkte überwacht werden, denn einige Bereiche im Vorhersagegebiet können auf Grund von Konvergenz, Divergenz oder Deformation mit Lagrangeschen Punkten über- bzw. unterbesetzt sein. Um eine gleichmäßige Bedeckung zu gewährleisten, wird *Gitterglättung* durchgeführt. Solche Partikel, die einander zu nah geraten, werden bis zu einer gewissen Zahl vernachlässigt bzw. eine unterbesetzte Umgebung wird mit neuen Partikel und zugehörigen Amplituden ausgestattet. Deshalb wird jede Lagrangesche Amplitude $\hat{\phi}_j$ einem Eulerschen Gitterintervall durch $\hat{X}_j \in \tilde{I}_i = [\tilde{X}_i, \tilde{X}_{i+1})$ zugeordnet. Sollte eine Gitterbox \tilde{I}_i mehrere bewegliche Punkte enthalten, wird unter den konkurrierenden Amplituden der Wert von $|\hat{\phi}_j - \hat{\phi}_{j-1}| + |\hat{\phi}_j - \hat{\phi}_{j+1}|$ berechnet. Die Amplitude, zu der in dieser Weise der größte Wert berechnet wird, bleibt erhalten. Ebenso wird ein solches Eulersches Intervall \tilde{I}_i , das keine Lagrangesche Amplitude enthält, durch Interpolation über benachbarte Lagrangesche Punkte mit einer neuen Amplitude versehen, wobei hierfür insbesondere die monotone lineare Interpolation geeignet ist, um die Monotonität durch Interpolation höherer Ordnung nicht zu verletzen.

Durch Gitterglättung kann sich die Anzahl der Lagrangeschen Partikel ständig ändern. Es ist eine Frage der Effizienz und der gesetzten Ziele der numerischen Studien, wieviele Lagrangesche Partikel insgesamt zugelassen werden bzw. nach welchen Kriterien Partikel weggelassen oder ergänzt werden. In den barotropen Modellrechnungen, sowie den weite-

3. Die nicht-interpolierende Methode

ren Anwendungen dieser Arbeit wird die Anzahl der Lagrangeschen Partikel so geregelt, daß das Verhältnis $\dim(\hat{X}) \geq \dim(\tilde{X})$ gelte.

Die Berechnung der Trajektorien der einzelnen Partikel $\{\hat{X}_j, \hat{\phi}_j\}$ erfolgt in gleicher Weise wie bei interpolierenden semi-Lagrangeschen Methoden, das heißt mit Hilfe von (2.43). Es soll lediglich das Vorzeichen in der gewählten Prozedur vertauscht werden, da wir nicht an der Herkunft des Luftpaketes interessiert sind, sondern an den Koordinaten am Endpunkt einer Vorwärtstrajektorie. Das nicht-interpolierende Verfahren stützt sich auf einen Iterationszyklus, der den Verschiebungsvektor $\hat{\alpha}_j$ für jeden beweglichen Punkt $\hat{X}_j \in [\tilde{X}_i, \tilde{X}_{i+1})$ und dessen Amplitude $\hat{\phi}_j$ als

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_j^{(0)} &= \tilde{U}(\hat{X}_j) \cdot \Delta t + \hat{X}_j \\ \hat{\alpha}_j^{(k+1)} &= \tilde{U}(\hat{X}_j + \hat{\alpha}_j^{(k)}/2) \cdot \Delta t + \hat{X}_j\end{aligned}\quad (3.3)$$

erzeugt (siehe auch (2.43)). In der Notation bedeutet k den Iterationsindex, Δt den Zeitschritt, $\tilde{U}(\hat{X}_j)$ die Geschwindigkeit im Punkt \hat{X}_j zum Zeitpunkt $t = (n + 1/2) \cdot \Delta t$. Mit n wird der ganzzahlige Index bezeichnet, der zur Diskretisierung der Zeit gemäß (2.15) verwendet wurde. Die Geschwindigkeitskomponenten bleiben während der Simulation auf dem von Modellen bislang benutzten (Eulerschen) Gitter gespeichert und werden nicht auf die Partikel übertragen. Die Geschwindigkeit $\tilde{U}(\hat{X}_j)$ wird durch (in unserem Fall lineare) Interpolation L aus der Nachbarschaft des Punktes \hat{X}_j als

$$\tilde{U}(\hat{X}_j) = L(\tilde{U}_i, \tilde{U}_{i+1}) = \frac{\hat{X}_j - \tilde{X}_i}{\tilde{X}_{i+1} - \tilde{X}_i} \cdot \tilde{U}_{i+1} + \frac{\tilde{X}_{i+1} - \hat{X}_j}{\tilde{X}_{i+1} - \tilde{X}_i} \cdot \tilde{U}_i \quad (3.4)$$

gewonnen, wobei $\tilde{U}_i = \tilde{U}(\tilde{X}_i)$ und $\hat{X}_j \in [\tilde{X}_i, \tilde{X}_{i+1})$.

Aus der in (3.3) verwendeten Bezeichnung der mittleren Zeitebenen $n + 1/2$ zwischen den Zeitebenen des Ausgangszustands n und dem zu errechnenden Zustands $n + 1$ geht hervor, daß es sich bei (3.3) um eine iterative Näherung von (2.41) für eine Zweizeitebenen-Integrationsmethode handelt. Staniforth & Côté (1998) und McDonald (1998) extrapolieren die Geschwindigkeit auf die mittlere Zeitebene $n + 1/2$ aus vergangenen Zuständen. In dieser Arbeit wird die Geschwindigkeit stattdessen aus dem Zustand zum Zeitpunkt n durch Vorwärtsintegration abgeleitet. Zu diesem Zweck wird die einfache Diskretisierung der Advektionsgleichung mit finiten Differenzen nach Lax (Press *et al.*, 1992) angesetzt

$$\tilde{U}_i^{n+1/2} = \overline{\tilde{U}_i^n}^x - \tilde{U}_i^n \cdot (\tilde{U}_x)_i^n \cdot \Delta t/2, \quad (3.5)$$

in der

$$\overline{\tilde{U}_i^n}^x = (\tilde{U}_{i+1}^n + \tilde{U}_{i-1}^n)/2 \quad (3.6)$$

und

$$(\tilde{U}_x)_i^n = (\tilde{U}_{i+1}^n - \tilde{U}_{i-1}^n) / (2 \cdot \Delta x) . \quad (3.7)$$

Auf Grund der Erfahrung mit interpolierenden semi-Lagrangeschen Methoden ist es erlaubt, die Iteration nach $k = 0$ abzubrechen. Dann läßt sich die Approximation der passiven Advektion in der Form

$$\begin{aligned} \hat{X}_j^{n+1} &= \hat{X}_j^n + \hat{\alpha}_j^1 \\ \hat{\phi}_j^{n+1} &= \hat{\phi}_j^n \quad \forall j \end{aligned} \quad (3.8)$$

schreiben.

Bei Staniforth & Côté (1998) und McDonald (1998) findet man die Formulierung der Iteration (3.3) für Dreizeitebenen-Integrationsmethoden, was rechentechnisch gleichermaßen zu realisieren ist. Wegen des Auseinanderdriftens der Lösungsfamilien, das bei Dreizeitebenen-Methoden zu erwarten ist und welches sich stark auf das Lagrange-Gitter auswirken könnte, erscheint es jedoch zweckmäßiger, sich auf eine Zeitintegration zu beschränken, die nur die zuletzt errechnete Zeitebene benutzt, um auf die neuen Feldwerte zu schließen.

3.3 Transformationsbeziehungen

Nach der Darstellung der numerischen Beschreibung von passiver Advektion mit der nicht-interpolierenden Lagrangeschen Methode kann man feststellen, daß der Advektionsprozess nur auf dem Lagrange-Gitter stattfindet. Ein zeitlich konstantes Gitter wird zwar eingeführt, dient aber einzig dem Zweck, die Geschwindigkeit zu definieren. In Anlehnung an die Zielsetzung, die Programmroutine der nicht-interpolierenden Advektionsmethode als eine Einheit eines beliebigen meteorologischen Modells zu gestalten, ist man darauf angewiesen, eine Korrespondenz zwischen diesem neuen Programm-Modul und anderen Routinen herzustellen, die allerdings ihr Näherungskonzept beibehalten und die für sie vorgesehenen atmosphärischen Prozesse auf dem Eulerschen Gitter darstellen.

Die nötigen Transformationsbeziehungen kann man herleiten, wenn ähnlich zu den Eulerschen Gitterboxen \tilde{I}_i auch Lagrangesche Gitterintervalle

$$\hat{I}_j = \left[\frac{\hat{X}_{j-1} + \hat{X}_j}{2}, \frac{\hat{X}_j + \hat{X}_{j+1}}{2} \right) \quad (3.9)$$

eingeführt werden, in denen der Variablen $\hat{\phi}_j$ ein konstanter Wert zugeordnet wird. Gleichzeitig ist eine Definition für die Länge $I_{i,j}$ des Überlappens $\hat{I}_j \cap \tilde{I}_i$ zwischen einem Inter-

3. Die nicht-interpolierende Methode

vall \hat{I}_j des Lagrangeschen Gitters und einem Intervall \tilde{I}_i des Eulerschen Gitters erforderlich. Die Projektion T^{LE} des Skalarfeldes $\hat{\phi}_j$ vom Lagrangeschen Gitter auf das Eulersche ergibt sich dann aus der Summe der gewichteten Lagrangeschen Amplituden

$$\tilde{\phi}_i = \frac{1}{\Delta x} \sum_j I_{i,j} \hat{\phi}_j . \quad (3.10)$$

Dabei beschränkt sich die Summation nur auf solche Amplituden $\hat{\phi}_j$, deren Umgebung \hat{I}_j mit dem gegebenen Eulerschen Intervall \tilde{I}_i überlappt, das heißt $I_{i,j} > 0$. Die Transformation T^{EL} , die das Feld vom Eulerschen Gitter auf das Lagrangesche überträgt, erhält man nach analoger Überlegung als

$$\hat{\phi}_j = \frac{2}{(\hat{X}_{j+1} - \hat{X}_{j-1})} \sum_i I_{j,i} \tilde{\phi}_i , \quad (3.11)$$

wobei die Summe wiederum nur für solche Eulerschen Intervalle gebildet wird, die mit \hat{I}_j überlappen.

Man beachte, daß diese Transformationen keine Umkehrtransformationen zueinander sind. Sie stellen viel mehr eine Art Interpolation dar. Ihre Wirkung entfaltet sich allerdings nicht in der numerischen Behandlung der Advektion sondern in der Berechnung von anderen noch zu berücksichtigenden Prozesse.

3.4 Das Zeitschema

Die Implementierung des nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Verfahrens erfolgt im Rahmen der zeitlichen Integration des Modells (3.2) mit dem Zweizeitenen-Verfahren vom Typ Lax-Wendroff. Die Rechenschritte der numerischen Integration, die z.B. bei Haltiner & Williams (1980) und Press *et al.* (1992) beschrieben ist, werden im weiteren für den Fall der ebenen unteren Berandung ($z(x) = 0$) dargestellt. Dabei wird die eingeführte Unterscheidung zwischen der Lagrangeschen und Eulerschen Felddarstellung durch die Symbole Dach und Schlange weiter verwendet.

Man gehe zunächst davon aus, daß U , V und H auf dem beweglichen Gitter definiert sind.

- Da die zeitliche Entwicklung des barotropen Modells ausschließlich im Lagrangeschen Raum verfolgt wird, sind U , V und H auf dem beweglichen, Lagrangeschen Gitter als \hat{U} , \hat{V} und \hat{H} definiert. Sie müssen als erstes auch auf dem Eulerschen

3.4. Das Zeitschema

Gitter bereitgestellt werden. Dies geschieht mit der Transformation T^{LE}

$$\begin{aligned}\tilde{U}^n &= T^{LE}(\hat{U}^n) \\ \tilde{V}^n &= T^{LE}(\hat{V}^n) \\ \tilde{H}^n &= T^{LE}(\hat{H}^n) .\end{aligned}\tag{3.12}$$

- Danach werden alle Variablen für den Zeitpunkt $n + 1/2$ berechnet,

$$\begin{aligned}\tilde{U}^{n+1/2} &= \overline{\tilde{U}^n}^x + (\tilde{U}_A + \tilde{U}_G)^n \cdot \Delta t/2 \\ \tilde{V}^{n+1/2} &= \overline{\tilde{V}^n}^x + (\tilde{V}_A + \tilde{V}_G)^n \cdot \Delta t/2 \\ \tilde{H}^{n+1/2} &= \overline{\tilde{H}^n}^x + (\tilde{H}_A + \tilde{H}_G)^n \cdot \Delta t/2 ,\end{aligned}\tag{3.13}$$

wobei

$$\begin{aligned}\tilde{U}_A &= -\tilde{U} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial x}, & \tilde{U}_G &= -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x} + f_0 \tilde{V} \\ \tilde{V}_A &= -\tilde{U} \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x}, & \tilde{V}_G &= -H_{y_0} - f_0 \tilde{U} \\ \tilde{H}_A &= -\tilde{U} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x}, & \tilde{H}_G &= -\tilde{H} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial x} .\end{aligned}\tag{3.14}$$

- Die aus (3.13) resultierenden Werte sind die Startwerte für die nicht-interpolierende Advektionsmethode, die zum einen aus der Berechnung der Advektionsgeschwindigkeit durch (3.5)-(3.7) besteht, zum zweiten die Kenntnis der Trajektorien durch (3.8) benötigt. Damit erhält man eine neue Gitterverteilung mit alten Amplituden.
- Desweiteren gelten $\tilde{U}^{n+1/2}$, $\tilde{V}^{n+1/2}$, $\tilde{H}^{n+1/2}$ als Eingabegrößen für die Terme auf der rechten Seite des Systems (3.2), die die geostrophische Anpassung steuern

$$\begin{aligned}\tilde{U}_G^{n+1/2} &= - \tilde{H}_x^{n+1/2} + f \tilde{V}^{n+1/2} \\ \tilde{V}_G^{n+1/2} &= - H_{y_0} - f \tilde{U}^{n+1/2} \\ \tilde{H}_G^{n+1/2} &= - \tilde{H}^{n+1/2} \tilde{U}_x^{n+1/2} .\end{aligned}\tag{3.15}$$

- Als nächstes erfolgt die Rücktransformation der Terme der rechten Seite von (3.2) auf das bewegliche Gitter

$$\begin{aligned}\hat{U}_G^{n+1/2} &= T^{EL}(\tilde{U}_G^{n+1/2}) \\ \hat{V}_G^{n+1/2} &= T^{EL}(\tilde{V}_G^{n+1/2}) \\ \hat{H}_G^{n+1/2} &= T^{EL}(\tilde{H}_G^{n+1/2}) .\end{aligned}\tag{3.16}$$

3. Die nicht-interpolierende Methode

- Zum Schluß werden die Tendenzen (3.16) dem Lagrangeschen Feld hinzuaddiert, welches bereits die neue Gitterverteilung aufweist, dessen Amplituden sich jedoch ändern

$$\begin{aligned}
 \hat{U}^{n+1} &= \hat{U}^n + \hat{U}_G^{n+1/2} \cdot \Delta t \\
 \hat{V}^{n+1} &= \hat{V}^n + \hat{V}_G^{n+1/2} \cdot \Delta t \\
 \hat{H}^{n+1} &= \hat{H}^n + \hat{H}_G^{n+1/2} \cdot \Delta t .
 \end{aligned}
 \tag{3.17}$$

3.5 Ergebnisse barotroper Modellstudien

Ziel der Modellstudien ist, die Genauigkeit der nicht-interpolierenden Methode zu überprüfen. Zu diesem Zweck wird das System (3.2) in seinem dynamischen Gleichgewichtszustand betrachtet, $dU/dt = 0$, $dV/dt = 0$ und $dH/dt = 0$. Demgemäß verschwinden in (3.2) sämtliche linke Seiten, und die so zu gewinnende Gleichgewichtslösung, die gleichzeitig auch das geostrophische Kräftegleichgewicht einschließt, lautet:

$$\begin{aligned}
 U(x, t) &= U(x - U_0 t) = U_0 \\
 H(x, t) &= H(x - U_0 t) \\
 V(x, t) &= \frac{1}{f_0} \frac{\partial H}{\partial x} .
 \end{aligned}
 \tag{3.18}$$

Da diese Lösung die konstante Verlagerung des Geopotentials H und der daraus abgeleiteten meridionalen Windgeschwindigkeit V beschreibt, läßt die Integration (mit Blick auf numerische Lösungen) erwarten, daß die Anfangsverteilung sich entlang des Gitters verschiebt und dabei unverändert bleibt.

In der folgenden Modellstudie soll durch Vergleich der interpolierenden und nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Lösungsmethoden geprüft werden, in welchem Maße die beiden Methoden dieser Erwartung gerecht werden und welches Lösungsverfahren im Bezug auf das erwähnte Anfangswert-Problem genauere Ergebnisse liefert.

Dazu fand die Berechnung der numerischen Lösungen auf einem Gitter mit $M_x=129$ Punkten und einer konstanten Maschenweite von $\Delta x = 10$ km statt. Für den CORIOLIS-Parameter und den zonalen Grundstrom wurden $f_0 = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ und $U = U_0 = 30 \text{ m/s}$ gesetzt. Das Geopotential der mittleren Höhe vom Flachwasser betrug $\bar{H} = 20000 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Dieser mittleren Höhe wurde im Anfangszustand am Gitterpunkt 39 eine geglättete Störung H' überlagert, und aus dem so bestimmten $H = \bar{H} + H'$ Feld die geostrophische Geschwindigkeitsverteilung gemäß $f_0 V = \partial H / \partial x$ berechnet.

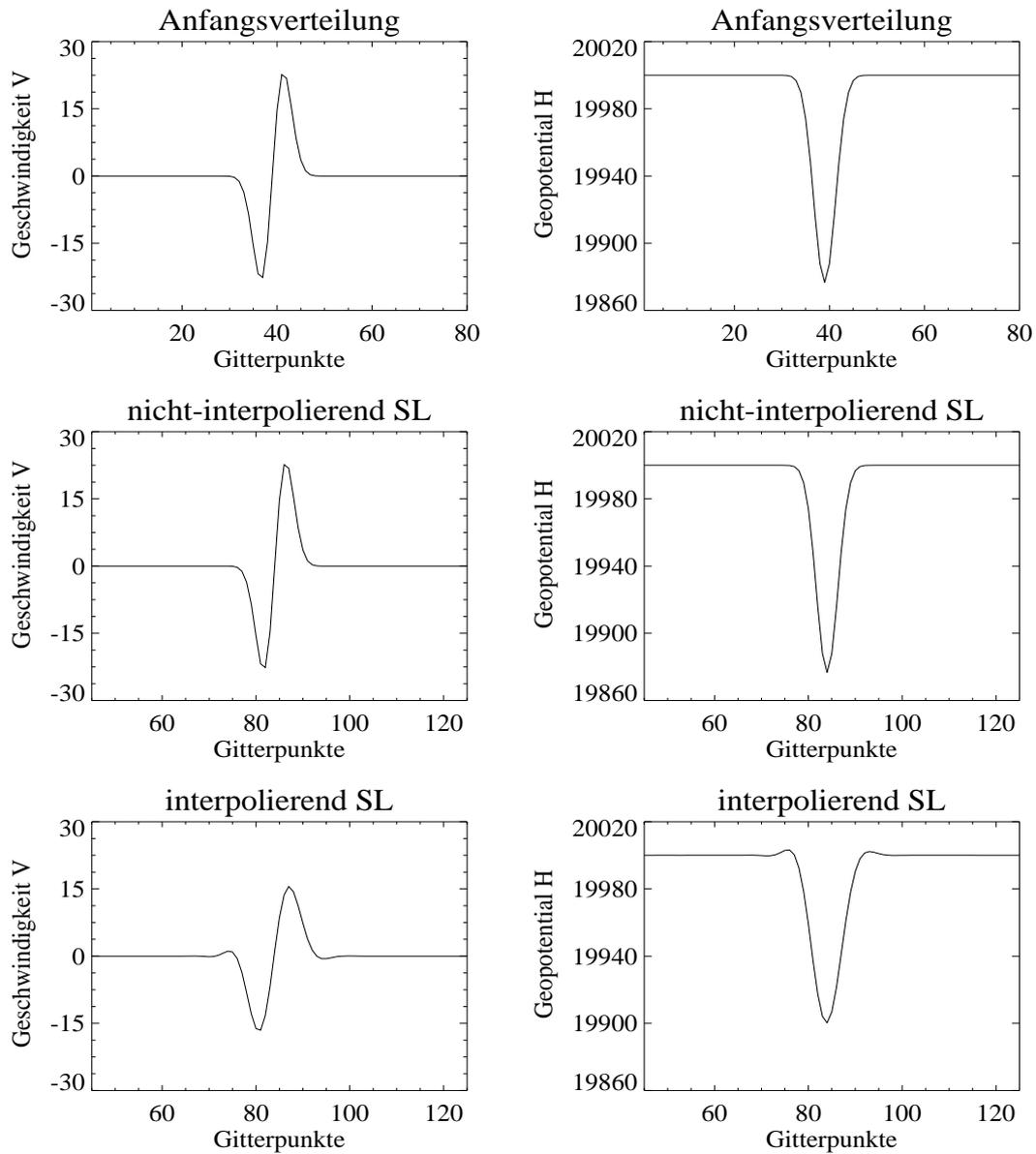


Abbildung 3.1: Dargestellt sind die meridionale Geschwindigkeit V (links) und das Geopotential H (rechts) für die gegebenen Anfangsbedingungen (obere Reihe) sowie die numerischen Lösungen des Gleichgewichtszustandes mit der nicht-interpolierenden Lagrangeschen Methode (mittlere Reihe) bzw. der interpolierenden Lagrangeschen Methode (untere Reihe). Es wurden 716 Recheniterationen mit einem Zeitschritt von $\Delta t = 60\text{s}$ durchgeführt. Dies entspricht einer Integrationszeit von etwa 12 Stunden.

3. Die nicht-interpolierende Methode

Die Anfangsbedingungen entlang des eindimensionalen Gitters sind graphisch in der oberen Reihe der Abb. (3.1) dargestellt. Die unteren beiden Graphiken zeigen das numerische Ergebnis mit der nicht-interpolierenden semi-Lagrangeschen Methode (mittlere Reihe) und mit der interpolierenden semi-Lagrangeschen Methode (unten).

An den dargestellten Ergebnissen kann man beobachten, daß die Störung im H -Feld bzw. in der daraus über das geostrophische Gleichgewicht berechneten V -Verteilung von West nach Ost eine Strecke von 45 Gitterintervallen durchlaufen. Im Gegensatz zu der erwarteten Verlagerung ohne Veränderung der Feldverteilung treten bei der Simulation mit der interpolierenden Methode numerische Fehler auf, obwohl die Felder von V und H vor der Integration geglättet worden sind. Der Trog im Geopotential wird allmählich aufgefüllt und breitet sich um seinen Mittelpunkt herum nach beiden Seiten aus. Als Folge dessen sinkt die meridionale Geschwindigkeit und es kommt zu Überschwingungen in der V -Verteilung. Dieses Ergebnis stimmt mit den Resultaten von Williamson & Rasch (1989) über passive Advektion von glatten bzw. diskontinuierlichen Anfangsbedingungen überein. Sie haben zahlreiche Interpolationspolynome untersucht und festgestellt, daß insbesondere oszillierende Interpolationen Überschüsse an den diskontinuierlichen Übergängen erzeugen. Mit dem nicht-interpolierenden Verfahren bleibt hingegen die Form der Störung der H - und V -Verteilung exakt erhalten und die Advektion findet dementsprechend ohne Veränderung der Anfangsprofile statt.

Die zweite Modellstudie, deren Resultate in Abb 3.2 dargestellt sind, bezieht sich auf die Überströmung einer Erhebung mit konstanter Windgeschwindigkeit. Edelmann (1972) gibt die stationäre Lösung dieser Aufgabe in Abhängigkeit von einer Parameterfunktion an. Diese Parameterfunktion, die auch die Form der Erhebung bestimmt, wird mit $W(x) = -b \exp(-a(x - x_0)^2)$ als Glockenfunktion definiert. Im ersten Experiment werden für die Konstanten a und b die Werte $a = 2/(20 \cdot \Delta x)$ und $b = 10^8$ verwendet, im zweiten die Werte $a = 2/(6 \cdot \Delta x)$ und $b = 10^7$. Von den Parametern a und b unabhängig wurde die Überströmung mit einem Zeitschritt von $\Delta t = 60$ s und einer Anfangsgeschwindigkeit von $U(x, t = 0) = 10$ m/s berechnet. In den Abb. (3.2) wird die stationäre Trägheits-Schwerewelle graphisch dargestellt, die infolge der Bergüberströmung im Geopotential H zustandekommt. Die oberen Graphiken zeigen die analytischen Lösungen für die unterschiedlichen Anfangsbedingungen, die mittleren und unteren die mit der nicht-interpolierenden bzw. interpolierenden Methode numerisch errechneten Ergebnisse. Das orographische Hindernis ist in den Graphiken nicht dargestellt, es ist nur über den Verlauf des H -Feldes bzw. Lage der assoziierten stationären Trägheits-Schwerewellen indirekt wahrnehmbar.

Im Falle der Überströmung des breiten Hindernisses, die in den Graphiken a, c, e in

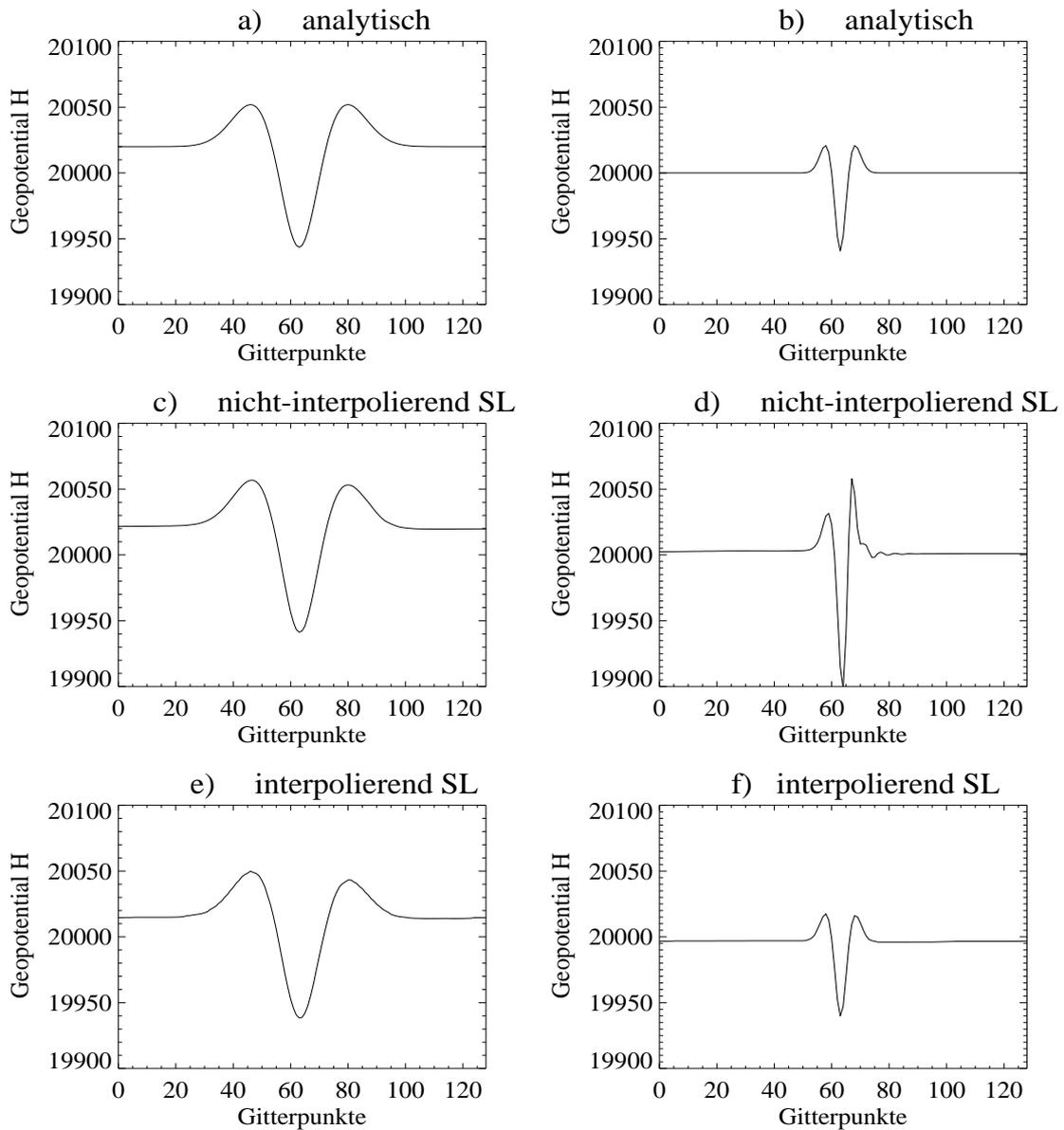


Abbildung 3.2: Dargestellt ist der stationäre Zustand des Geopotentials H während der Überströmung einer breiten, flachen Erhebung (linke Spalte) sowie einer schmalen, kleinskaligen Erhebung (rechte Spalte). Die symmetrischen Erhebungen sind in der Abbildung nicht sichtbar. Sie wurden durch eine GAUSSsche Verteilungsfunktion vorgegeben (siehe Diskussion der Ergebnisse). Die obere Reihe der Graphiken zeigt die analytische Lösung nach Edelman (1972), die mittlere die numerische nicht-interpolierende semi-Lagrangesche Berechnung, die untere die numerische interpolierende semi-Lagrangeschen Berechnung. Die Integrationszeit betrug 4 Tage bei einem Zeitschritt von $\Delta t = 60\text{s}$.

3. Die nicht-interpolierende Methode

Abb. 3.2 dargestellt ist, unterscheiden sich die numerischen Lösungen von der analytischen Lösung kaum. Anders jedoch bei der Überströmung der schmalen, kleinskaligen Erhebung, wofür die Ergebnisse in den Graphiken b, d, f in Abb. 3.2 zu sehen sind: hier berechnet das nicht-interpolierende Verfahren eine starke Überreaktion im Geopotential H . Die fehlerhafte Stärkung der seitlichen Wellenspitzen, sowie des dazwischenliegenden Wellentales liegt an der niedrigen Genauigkeit der Transformationsbeziehungen. Dies konnte durch Erhöhung der Glättung nach wiederholter Transformation gezeigt werden. Verbesserte Transformationsbeziehungen wären Interpolationen höherer Ordnung, die allerdings ohne spezielle Annahmen zu oszillierenden Ergebnissen führen, oder, wie Steppler & Prohl (1996) vorgeschlagen haben, Umkehrtransformationen, deren Berechnung wegen der zeitlich variablen Struktur des Lagrangeschen Gitters erheblich mehr Rechenzeit erfordert.

In der letzten Anwendung des nicht-interpolierenden Verfahrens auf das barotrope Flachwassermodell wurde die Advektion einer geostrophisch balancierten Anfangsstörung über einem Gebiet mit einem idealisierten Hindernis untersucht. Die (nicht eingezeichnete) Erhebung, ist wieder nur indirekt aus dem Verlauf des Geopotentials $H(x)$ wahrnehmbar. Im Bereich des Hindernisses wird als spezielle Anfangsbedingung die stationäre und deshalb näherungsweise geostrophisch balancierte, numerische Lösung aus dem Experiment in Abb. 3.2 verwendet. Außerdem wird auf dieses Feld am linken Rand des Vorhersagegebietes eine geglättete, in sich ebenfalls geostrophisch balancierte Störung hinzuaddiert.

Die Verteilung des Geopotentials H wird in den Abbildungen 3.3 und 3.4 in verschiedener Weise graphisch dargestellt. Die Abb. 3.3 zeigt das Geopotential der freien Oberfläche im ganzen Vorhersagegebiet zum Anfangszeitpunkt bzw. zu verschiedenen späteren Zeitpunkten als Resultat der numerischen Berechnung. In Abb. 3.4 wurde ein mittlerer Abschnitt des Gebietes vergrößert, um die Lagrangeschen Partikel darzustellen. Die Länge der vertikalen Linien ist ein Maß für die Amplituden der Feldwerte von beweglichen Punkten. Die Verteilung der vertikalen Linien markiert den physikalischen Ort der beweglichen Punkte.

Die Abb. 3.3 und 3.4 zeigen, wie die Störung im Laufe der Zeit das Hindernis überquert. Zunächst bewegt sie sich auf den Trog zu, der durch die Überströmung der orographischen Erhebung entstanden ist. Nach 10 Stunden befindet sich die Störung über der Erhebung, der Trog nimmt an Tiefe zu. Weitere 14 Stunden später sieht man die Störung rechts aus dem mittleren Tiefdruckgebiet auslaufen, wobei sich die Form der Störung nur leicht verändert hat. Diese Veränderung ist eine Folge des Ungleichgewichts, welches deshalb entsteht, weil das Anfangsfeld im Bereich der Störung nicht vollständig

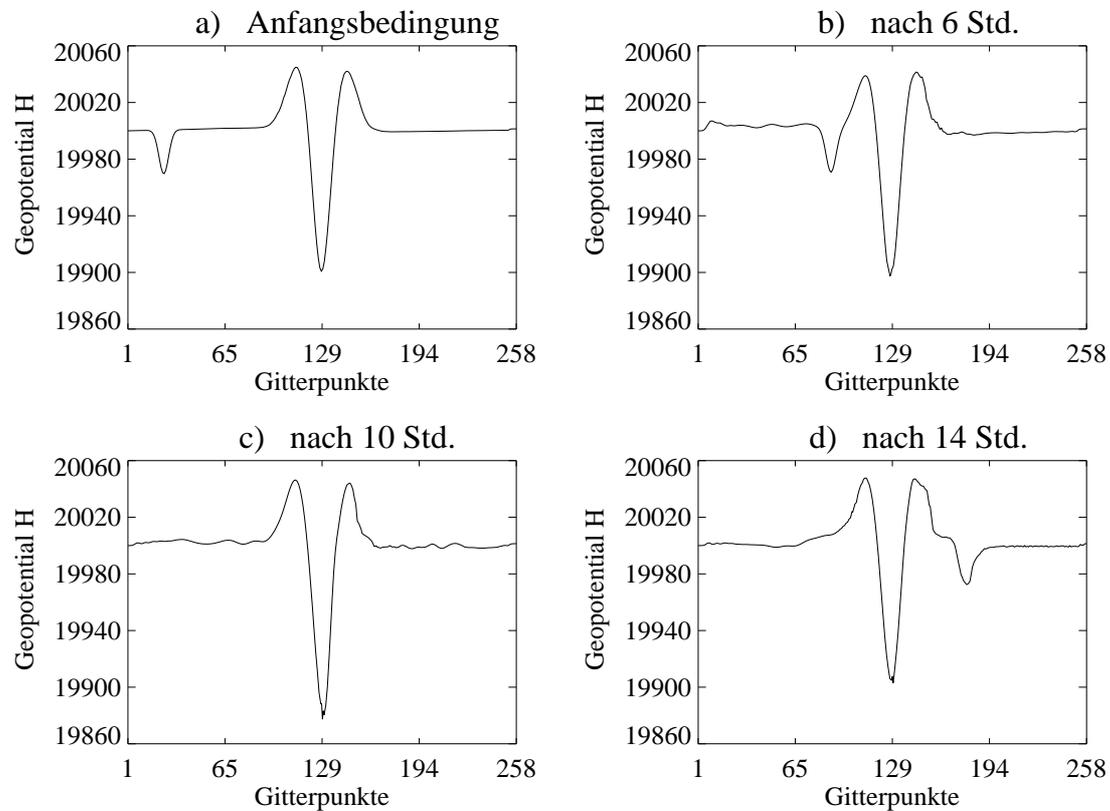


Abbildung 3.3: Dargestellt ist der Anfangszustand und die Entwicklung des Geopotentials H nach 6, 10 und 14 Stunden während der Überströmung einer Erhebung durch eine fast geostrophisch balancierte Störung. Dem lärmfreien Anfangszustand durch die stationäre numerische Lösung wurde westlich eine in sich geostrophisch balancierte Störung hinzuaddiert (Graphik a). Die Störung überquert die glockenförmige Erhebung, die in der Abbildung nicht dargestellt ist, vom West nach Ost (Graphik b). Dabei wechselwirkt die Störung mit dem stationären Tief im Bereich der Erhebung (Graphik c) und bewegt sich mit der durch die stationäre Lösung vorgegebene Geschwindigkeit in östliche Richtung (Graphik d).

geostrophisch balanciert ist. Aus diesem Grund findet dort geostrophische Anpassung statt, die sich in der Form kleinskaliger Lärmprozesse bemerkbar macht. Als Folge der Anpassung verteilen sich die beweglichen Punkte zum Teil stark unregelmäßig, wobei die Ungleichmäßigkeiten im Toleranzbereich der Gitterglättung liegen.

Wenn man die Ergebnisse in Abb. 3.2 berücksichtigt, konnte nicht in jeder Modellstudie eine Verbesserung der Genauigkeit der numerischen Lösung durch die Anwendung des nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Verfahrens erreicht werden. Dennoch

3. Die nicht-interpolierende Methode

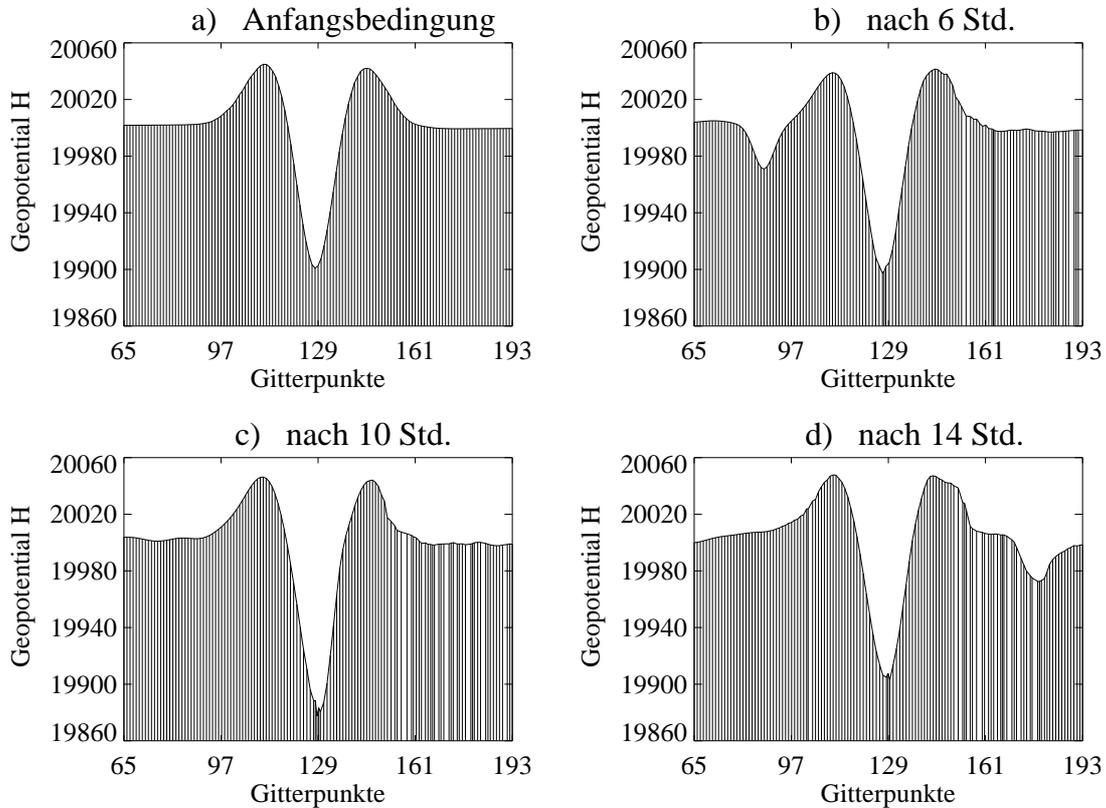


Abbildung 3.4: Wie in der Abb. 3.3, jedoch für die Eulerschen Gitterpunkte 65 bis 193. Die balancierte Störung ist in dieser Vergrößerung im Anfangszustand nicht sichtbar, da sie links vom Gitterpunkt 65 definiert ist. Mit den vertikalen Linien sind die Lagrangeschen Partikel markiert. Die Verteilung der Linien entspricht den physikalischen Positionen der beweglichen Punkte, die Länge der Linien dem Feldwert an den Punkten. Die Ungleichmäßigkeit der Linien weist auf die ungleichmäßige Verteilung der Partikel hin.

läßt sich für die Untersuchungen dieses Kapitels feststellen, daß die passive Advektion eines Skalarfeldes mit der nicht-interpolierenden Methode im Wesen fehlerfrei simuliert wird. Das ist die direkte Konsequenz der numerischen Lösungsprozedur, die keine Näherungsmethoden zur numerischen Berechnung von räumlichen Ableitungen verwendet und daher auch keine Näherungsfehler verursacht. Die Bestätigung erhält man aus dem eindimensionalen Experiment mit der geostrophisch balancierten Störung, die sich in östlicher Richtung mit konstanter Geschwindigkeit bewegt. Unter den getroffenen Modellannahmen und Anfangsbedingungen soll die Lösung von (3.2) die Verlagerung der geostrophisch balancierten Störung mit konstanter Geschwindigkeit beschreiben. Die Abb. 3.1

belegt die fehlerfreie Simulation des Vorganges mit der nicht-interpolierenden Methode gemäß der theoretischen Überlegung.

Im Experiment mit der konstanten Überströmung eines Hindernisses wurde die stationäre numerische Lösung der stationären Lösung von Edelman (1972) gegenübergestellt. Die Anfangsbedingungen waren nicht geostrophisch balanciert, weshalb die Zustandsänderung unter solchen Anfangsbedingungen als Wechselwirkung der ROSSBY- und Lärmprozesse stattfindet. Im stationären Zustand erreicht das System sein Gleichgewicht. In diesem Gleichgewicht bildet sich über der orographischen Erhebung ein stationäres Tief, dessen Präsenz man am Verlauf der prognostischen Größen, z.B. des Geopotentials $H(x)$, erkennt. Wie die Abb. 3.2 zeigt, wiedergibt das nicht-interpolierende Verfahren den Verlauf des Geopotentials $H(x)$ an diesem Tief überspitzt, wenn die Breite des Hindernisses ein bestimmtes Maß unterschreitet. Der numerische Fehler liegt an der niedrigen Genauigkeit der Transformationsbeziehungen; wiederholtes Anwenden der Transformationen T^{EL} und T^{LE} läßt den Fehler zunehmen.

Im letzten Experiment dieses Kapitels wurde die Überströmung einer Erhebung durch eine in sich geostrophisch balancierte Störung berechnet. Die Anfangsbedingungen waren dabei nahezu lärmfrei. Als Ergebnis der Modellstudie überquert die balancierte Störung das Gebiet des Hindernisses in einer beinahe unveränderten Form. Dieses ist, wie auch das Resultat der Berechnung der numerischen Lösung unter balancierten Anfangsbedingungen, als positives Ergebnis zu bewerten.

Die Resultate mit dem eindimensionalen barotropen Flachwassermodell haben gezeigt, daß die gleichzeitige Anwendung des nicht-interpolierenden Verfahrens zur Berechnung der Advektion von Geschwindigkeit und Geopotential zu Ungenauigkeiten führen kann. Der Grund dafür ist der Umkehreffekt der glättenden Transformation zwischen der Eulerschen und der Lagrangeschen Gitterdarstellung. Die Wechselwirkung zwischen den prognostischen Variablen wird durch die Ungenauigkeit der Transformationsbeziehungen nicht beeinflußt, wenn keine Berechnung der Advektion von Geschwindigkeit auf Grund der speziellen Formulierung des zu lösenden Problems erforderlich ist. Als Beispiel dafür wird im nächsten Kapitel die Ausbreitung einer chemisch quasi-inaktiven Substanz betrachtet.

3. Die nicht-interpolierende Methode

UNTERSUCHUNG WEITERER METEOROLOGISCH RELEVANTER PROBLEME MIT HILFE DER NICHT-INTERPOLIERENDEN METHODE

4.1 Ausbreitungsrechnungen auf Basis der Daten aus dem Europäischen Tracer Experiment, ETEX

In den Modellstudien dieses Unterkapitels werden Ausbreitungsszenarien von chemisch quasi-inaktiven Stoffkomponenten, sogenannten Tracergasen, nachgebildet. Die Besonderheit solcher Ausbreitungsszenarien liegt darin, daß die Beschreibung der Ausbreitung sich auf die Berechnung der Verlagerung der emittierten Stoffe beschränkt. Auf Grund dessen läßt sich in entsprechenden Modellexperimenten vor allem die Genauigkeit von numerischen Verfahren untersuchen, womit die Stoffadvektion berechnet wird.

Die europäische Meßkampagne ETEX wurde mit dem Ziel gestartet, die Genauigkeit der numerischen Berechnungen mit Blick auf Echtzeit-Vorhersagen zu prüfen. Zu diesem Zweck wurden in Rennes, Frankreich, verschiedene chemisch träge Substanzen freigesetzt und deren Ausbreitung gemessen. Die Meßdaten von zwei Ausbreitungsszenarien bilden die Grundlage unserer Modellstudien, da sich unter den erwähnten Modellannahmen die Advektion der Massenkonzentration mit dem nicht-interpolierenden Verfahren numerisch vorteilhaft berechnen läßt. Es wird deshalb die entsprechende Differentialgleichung verwendet, die die Ausbreitung in Luft freigesetzter Tracer-Substanzen beschreibt, wobei hierfür folgende Voraussetzungen zu erfüllen sind:

- es handelt sich um ein chemisch quasi-inaktives (träges) Tracer-Gas, d.h. chemische Reaktionen können vernachlässigt werden;
- unter molekularen Bedingungen wird der Tracer mit der Luftgeschwindigkeit 'transportiert', sodaß Unterschiede zwischen Tracer- und baryzentrischer Geschwindigkeit zu vernachlässigen sind.

Den Annahmen zufolge ist deshalb das in Kapitel 2 postulierte Bilanzgleichung (2.1) zu berücksichtigen, wobei die Massenkonzentration der mit n indizierten Stoffkomponen-

4. Anwendungsbeispiele

ten mit ψ , deren Massendichte mit $\rho_\psi = \rho\psi$ und der entsprechende Quellterm mit P_ψ bezeichnet werden. Hier bedeutet P_ψ die konstante Ausstoßrate.

Das Erhaltungsgesetz ist in den allgemeinen Koordinaten $q_i = q_i(t, x, y, z)$, $i = 1, 2, 3$ zu formulieren¹, um die Transformation in solche Koordinaten zu ermöglichen, die in der numerischen Berechnung verwendet werden. Somit gilt für das differentielle Volumen $dV = \sqrt{G} dq_1 dq_2 dq_3 = \sqrt{G} dV_q$, wobei mit $\sqrt{G} = \partial(x, y, z)/\partial(q_1, q_2, q_3)$ die Funktionaldeterminante der Koordinatentransformation bezeichnet wird. Damit ist das Erhaltungsgesetz folgendermaßen zu schreiben

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\psi \sqrt{G} dq_1 dq_2 dq_3 = 0. \quad (4.1)$$

Zur Lösung der Erhaltungsgleichung (4.1) wird mit der geographischen Länge λ und Breite φ sowie einer geländefolgenden Vertikalkoordinate η eine solche spezielle Orthogonal-Koordinatenbasis $\{q_1, q_2, q_3\}$ gewählt, die auch in der numerischen Wettervorhersage häufig verwendet wird. Die Transformation des differentiellen Volumens zwischen den kartesischen Koordinaten $\{x, y, z\}$ und dem $\{\lambda, \varphi, \eta\}$ -System erfolgt mittels der Zusammenhänge $dx = r \cdot \cos \varphi \cdot d\lambda$, $dy = r \cdot d\varphi$ und

$$dz = dr = \frac{\partial z}{\partial \eta} d\eta = \frac{\partial z}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \eta} d\eta = -\frac{1}{g\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta} d\eta. \quad (4.2)$$

Das Erhaltungsgesetz (4.1) gilt im neuen System unter der Bedingung, daß die Funktionaldeterminante $\sqrt{G} = -(r^2 \cos \varphi / g\rho)(\partial p / \partial \eta)$ definit ist.

Die Umwandlung des Erhaltungsgesetzes (4.1) in die der Gleichung (2.2) entsprechenden Form

$$\int_{V_q} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi \sqrt{G}) dV_q + \int_{\partial V_q} (\rho\psi \sqrt{G}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} df_q = \int_{V_q} p_\psi \sqrt{G} dV_q \quad (4.3)$$

bzw. in die Divergenzform

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi \sqrt{G}) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial q_i} (\dot{q}_i \rho\psi \sqrt{G}) = p_\psi \quad (4.4)$$

erfordert für den Ausdruck $\rho\psi \sqrt{G}$ die gleichen Rechenschritte wie die Herleitung von (2.2) und (2.4) für ρq_n . Lediglich muß man dabei das im neuen Koordinatensystem System $\{\lambda, \varphi, \eta\}$ gültigen Integrationsvolumen dV_q , sowie das differentielle Flächenelement df_q auf der gesamten Berandung ∂V_q berücksichtigen.

¹Die allgemeinen Koordinaten q_i werden zur Unterscheidung von den Stoffkomponenten q_n entweder numeriert oder nur mit dem Index i versehen.

4.1. Ausbreitungsrechnungen

4.1.1 Die Eulerschen und nicht-interpolierenden Lösungsmethoden

Die Lösung der Gleichungen (4.3) bzw. (4.4) wird parallel zur nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Methode mit einem nahezu positiven Flußverfahren² berechnet, um die Genauigkeit der beiden numerischen Lösungen zu vergleichen. Die Diskretisierung der Gleichung (4.3) und (4.4) für das Eulersche Ausbreitungsmodell findet man im Anhang A, die Eulersche sowie nicht-interpolierende Lösungsprozeduren werden in diesem Abschnitt beschrieben.

Um die Vergleichbarkeit der Lösungen zu gewährleisten, wurde die Berechnung der Schadstoffausbreitung für zwei solche Ausbreitungsszenarien durchgeführt, für die bereits Ergebnisse numerischer Berechnungen durch das Eulersche Ausbreitungsmodell des Deutschen Wetterdienstes (DWD) vorlagen, das die Modellannahmen des operationellen Europa Modells (EM) des DWD verwendet. Wie in der Beschreibung des EM durch Schrodin (1995) dargestellt, bedeutet dies eine zeitliche Diskretisierung mit $\Delta t = 300$ s und eine Maschenweite des horizontalen Gitters von $\Delta \lambda = \Delta \varphi = 0.5$ Grad. Die Größe des Gebietes von $181 \cdot 129$ Punkten sowie die vertikale Einteilung der Modellatmosphäre mit 20 Koordinatenflächen im geländefolgenden η -System entsprachen ebenfalls dem EM.

Die Lösung der Transportgleichung erfolgt, wie im EM, durch Trennung der horizontalen und vertikalen Lösungsanteile. Vertikaladvektion und Vertikaldiffusion werden in einer Säule an einem Gitterpunkt mit einem zeit-impliziten Verfahren des EM in Advektionsform ausgerechnet. Dieser Modellteil bleibt auch bei der nicht-interpolierenden numerischen Lösung unverändert.

Vor und nach der Berechnung des advektiven und turbulenten Transports erfolgt die zeit-explizite Berechnung der Horizontaladvektion in jeder Schicht über eine halbe Zeitschrittlänge. Beim DWD wurde hierfür ein nahezu positives, eindimensionales Flußverfahren nach Bott (1989, 1992) benutzt. Um der Zweidimensionalität bei der Horizontaladvektion mit einem eindimensionalen Ansatz gerecht zu werden, wechselt man in jedem vollen Zeitschritt die Reihenfolge, in der die Advektion in zonaler und meridionaler Richtung durchgeführt wird.

In der Lösungsprozedur der nicht-interpolierenden Methode wird dieses auf die einzelnen Schichten angewandte Flußverfahren gegen das Partikelverfahren ersetzt. Dementsprechend können nur horizontale Partikelbewegungen stattfinden und die Neuordnung der Partikelverteilung wird innerhalb einer Schicht wirksam. Die zweidimensionale Erweiterung der im Kapitel 3 eingeführten Gitterglättung verwendet auch diesmal lineare

²Die Methode berechnet die passive Advektion positiver Feldgrößen zwar nicht monoton, jedoch haben die Oszillationen nur eine geringe Amplitude.

4. Anwendungsbeispiele

(und deswegen monotone) Interpolation, sobald größere Flächen als ein Eulersches Intervall von keinem beweglichen Punkt besetzt werden. Die Stützpunkte der Interpolation im Lagrangeschen beweglichen Gitterraum werden nach Boris (1986) bestimmt.

Die zu vergleichenden Lösungsprozeduren lassen sich auf Grund der obigen Erläuterungen in folgenden Schritten zusammenfassen.

- Eulersche Methode:

- Horizontaladvektion [A_H in (A.4)] an jedem Gitterpunkt (i, j) in allen horizontalen Schichten über einen halben Zeitschritt
- Umrechnung der mitgeführten Modellgröße in der Form $\psi \cdot \Delta p$ in die massenspezifische Form ψ
- Vertikaladvektion [a_V in (A.5)] und vertikale turbulente Diffusion [d_V in (A.6) und (A.8)] in jeder vertikalen Säule an allen Gitterpunkten (i, j)
- Umrechnung der mitgeführten Modellgröße von der massenspezifischen Form ψ in die Form $\psi \cdot \Delta p$
- Horizontaladvektion [A_H in (A.4)] an jedem Gitterpunkt (i, j) in allen horizontalen Schichten über einen halben Zeitschritt

- nicht-interpolierende Methode:

- Horizontaladvektion mit dem nicht-interpolierenden Verfahren über einen halben Zeitschritt im Lagrangeschen Gitterraum der beweglichen Punkte
- Gitterglättung
- Projektion der Lagrangeschen $\psi \cdot \Delta p$ -Form ins feste, Eulersche Gitter
- Umrechnung der mitgeführten Modellgröße in der Form $\psi \cdot \Delta p$ in die massenspezifische Form
- Vertikaladvektion [a_V in (A.5)] und vertikale turbulente Diffusion [d_V in (A.6) und (A.8)] in jeder Säule an allen Gitterpunkten (i, j) , wie im EM
- Umrechnung der vertikalen Tendenzen von der massenspezifischen Form in die durch die vertikale Druckdifferenz Δp multiplizierte Form
- Projektion der vertikalen Tendenzen vom Eulerschen ins bewegliche Lagrangesche Gitter
- Addition der vertikalen Tendenzen zu den Amplituden auf dem Lagrangeschen Gitter

4.1. Ausbreitungsrechnungen

Die Lösungsprozeduren verlaufen außerhalb des EM. Es werden dazu entweder vom EM prognostizierte Feldgrößen, oder, wie in dieser Arbeit, analysierte Meßdaten der horizontalen Windgeschwindigkeit, Lufttemperatur, des Geopotentials, des Bodendruckes sowie des Massenbruches von Wasserdampf verwendet. Sie werden in einem Abstand von 6 Stunden eingelesen und innerhalb dieses Zeitintervalls linear interpoliert. Die interpolierten Werte dienen dann zur Berechnung der horizontalen und vertikalen Advektion bzw. des vertikalen turbulenten Austausches.

4.1.2 Ergebnisse der Ausbreitungsrechnungen

In diesem Abschnitt werden modell-berechnete Konzentrationen miteinander, sowie gegenüber solchen Konzentrationswerten verglichen, die während der Ausbreitung von zwei chemisch trägen Stoffen beobachtet wurden. Die Angaben zur Emission der Stoffe *pmch* und *pmcp* findet man in der Tabelle 4.1. Diese Daten, sowie die Meßdaten stammen vom Joint Research Centre of the European Commission (JRC) und wurden vom Deutschen Wetterdienst bereitgestellt.

Die Überprüfung der Genauigkeit der berechneten Konzentrationen ist trotz der vorhandenen Meßwerte nur eingeschränkt möglich, da die Daten nur dreistündige Mittelwer-

Stoff	Prognosestart	Gesamtmenge	Emissionsdauer
pmch	23.10.94 12h	341.28 kg	23.10 16h - 23.10 24h
pmcp	14.11.94 12h	475 kg	14.11 15h - 15.11 3h

Tabelle 4.1: Angaben zum Schadstoffausstoß vom Joint Research Centre of the European Commission (JRC).

Markierung	Bedeutung
■	gültige Messung, dessen Wert in der Größenordnung des Konturniveaus liegt
▣	gültige Messung, dessen Wert die Konturgröße um eine Größenordnung überschreitet
▲	der Meßwert liegt möglicherweise höher, als die Größenordnung des Konturniveaus
△	bedeutet einen Wert, der eine Größenordnung höher liegt, als der zu den dunklen Dreiecken gehörende

Tabelle 4.2: Bezeichnung der in den Abb. 4.1-4.8 verwendeten Symbole.

4. Anwendungsbeispiele

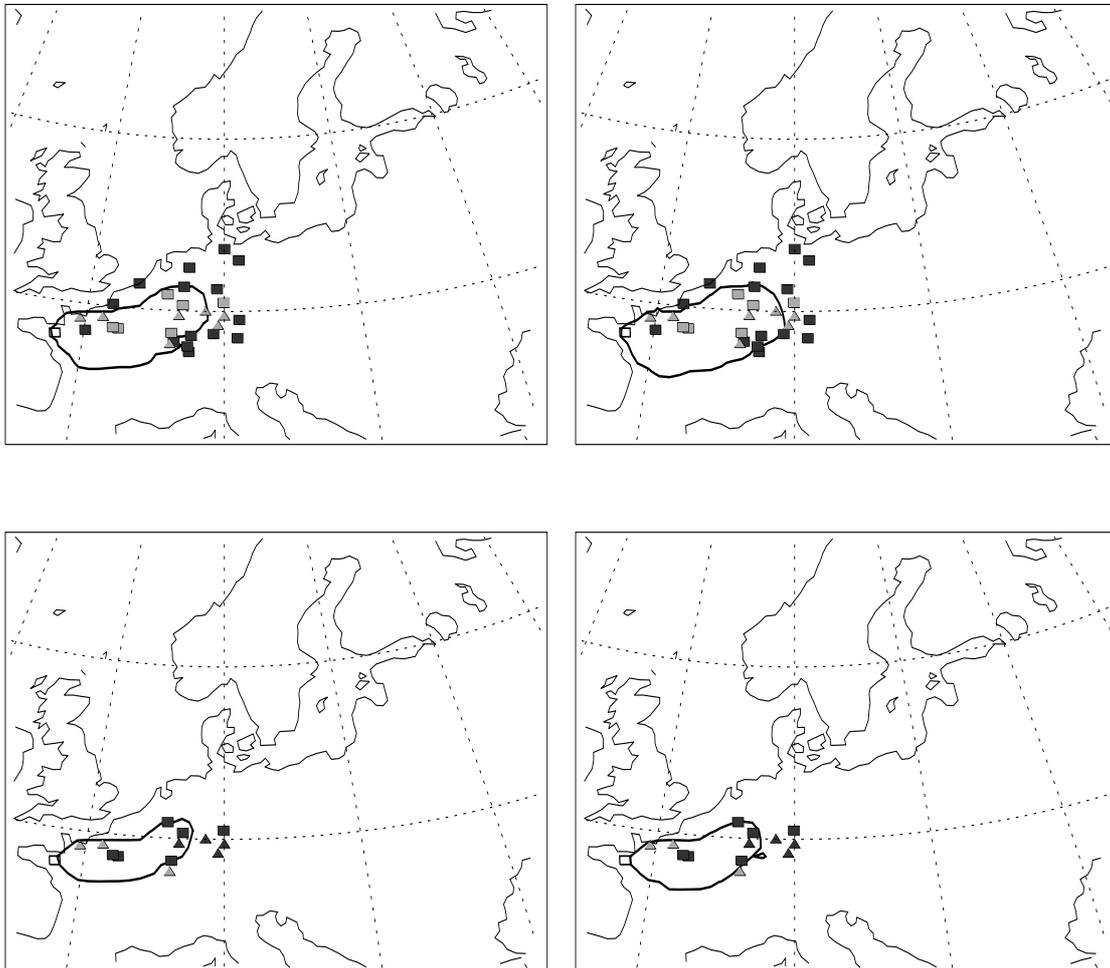


Abbildung 4.1: pmch-Verteilung nach 24 Stunden: dargestellt sind dreistündig gemittelte Meßwerte (mit Symbolen) und Ergebnisse von numerischen Berechnungen (mit Konturlinien) für die Schadstoffdichte von 10^{-11} kg/m³ (oben), 10^{-10} kg/m³ (unten) am Boden. Links stehen die Resultate mit dem Flußverfahren (DWD-Simulation), rechts mit dem nicht-interpolierenden Verfahren. Die verwendeten Symbole werden in der Tabelle 4.2 erklärt.

te der am Boden durchgeführten Messungen enthalten und deshalb als Richtwert für die berechnete Erstreckung der Schadstoffwolke betrachtet werden.

Um möglichst viele Daten aus der zur Verfügung stehenden Datenmenge als Grundlage eines Vergleiches verwenden zu können, wurden folgende Meßwerte der Partialdichten dargestellt: 10^{-11} kg/m³ und 10^{-10} kg/m³ für pmch, sowie 10^{-12} kg/m³ und 10^{-11}

4.1. Ausbreitungsrechnungen

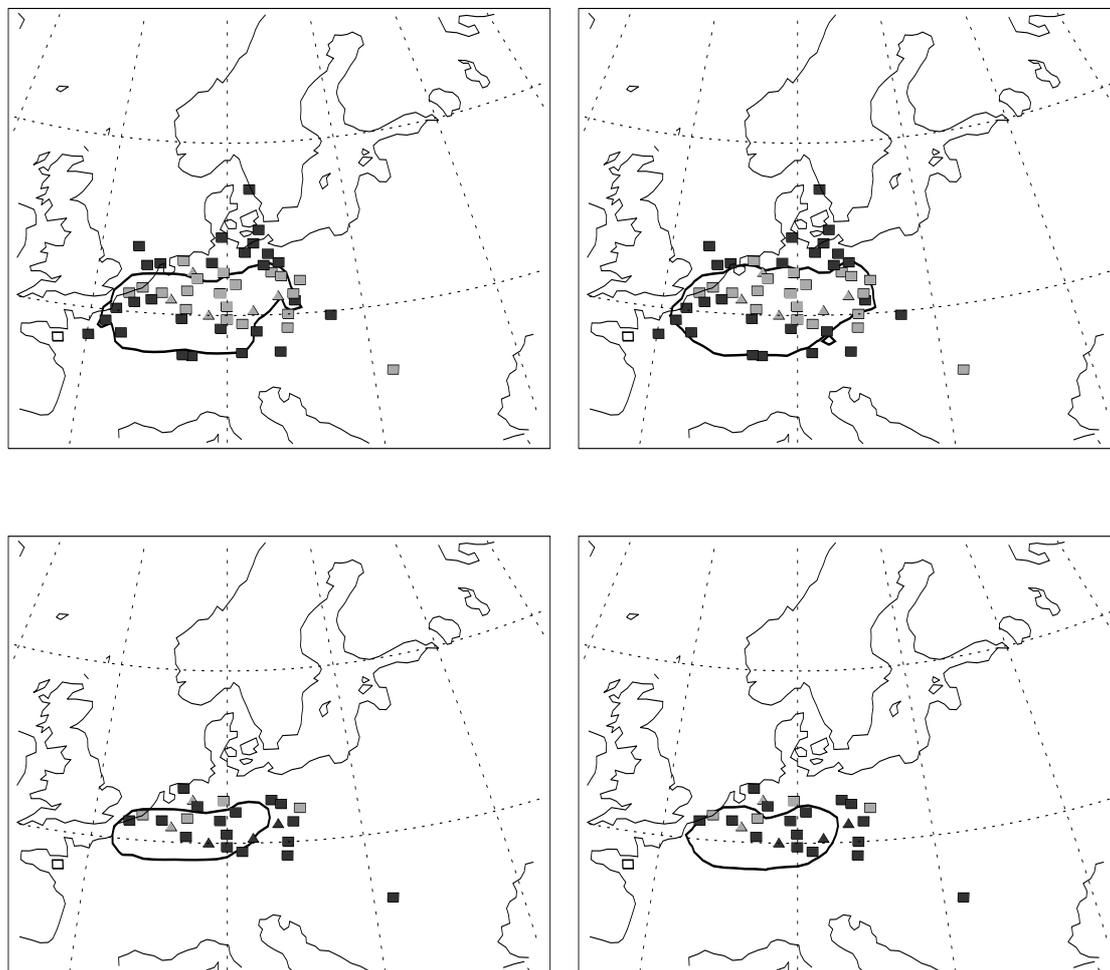


Abbildung 4.2: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung der pmch-Ausbreitung. Es handelt sich um den selben Modellauf wie bei Abb. 4.1, jedoch nach 36 Stunden.

kg/m^3 für pmcp. Dabei beziehen sich die Abb. 4.1 - 4.4 auf pmch, die Abb. 4.5 - 4.8 auf pmcp – in beiden Fällen nach 24, 36, 48, 60 Stunden. Wie es sich an der unterschiedlichen räumlichen Erstreckung der Konturlinien erkennen läßt, zeigen die oberen Grafiken in einer Abbildung jeweils die niedrigeren Werte, während die unteren Graphiken die höheren Werte.

In den Abbildungen sind links die Darstellung der Ergebnisse mit dem Eulerschen Ausbreitungsmodell, rechts die Resultate der nicht-interpolierenden numerischen Berech-

4. Anwendungsbeispiele

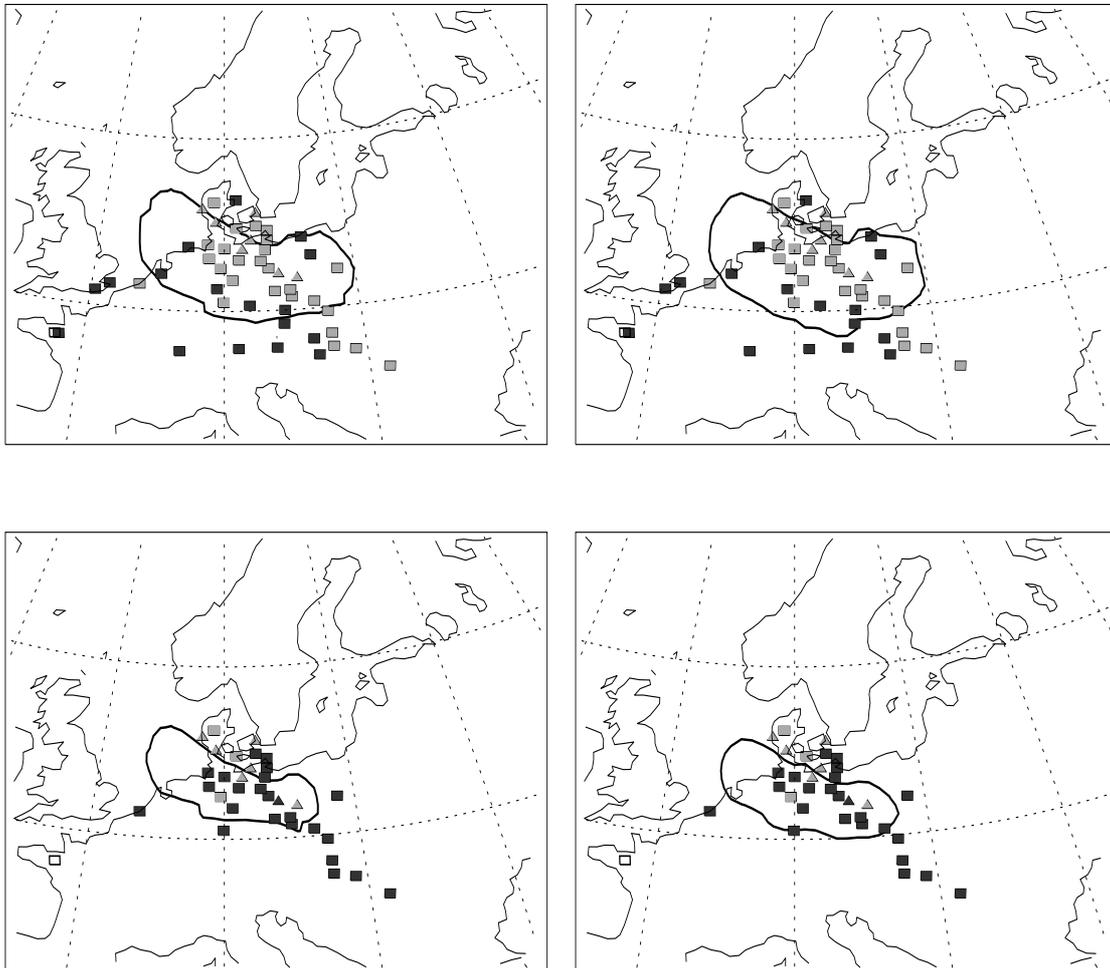


Abbildung 4.3: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung der pmch-Ausbreitung. Es handelt sich um den selben Modellauf wie bei Abb. 4.1, jedoch nach 48 Stunden.

nung zu sehen. Der Ausstoßort ist in jeder Grafik mit einem unshattierten Rechteck markiert. Die Tabelle 4.2 enthält die Erklärung zu den Symbolen, mit denen die Qualität der dargestellten Daten nach JRC beschrieben wird.

Der Vergleich der Ergebnisreihen vermittelt auf den ersten Blick eine große Ähnlichkeit, manchmal sogar Übereinstimmung der verschiedenen errechneten Resultate. Dessen wichtigste Konsequenz ist die Bestätigung der praktischen Anwendbarkeit der nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Methode. Zweitens kann man bei beiden Ex-

4.1. Ausbreitungsrechnungen

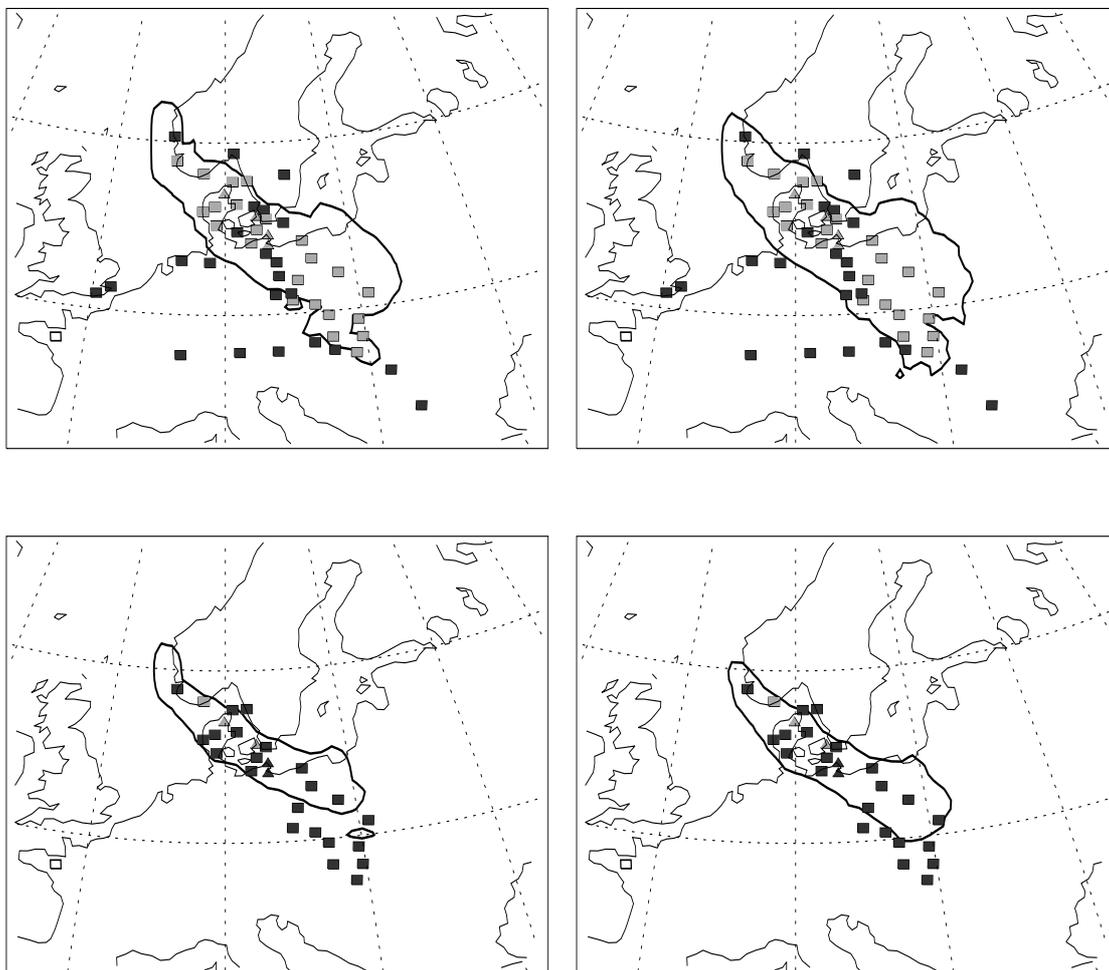


Abbildung 4.4: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung der pmch-Ausbreitung. Es handelt sich um den selben Modellauf wie bei Abb. 4.1, jedoch nach 60 Stunden.

perimenten beobachten, daß in den mit dem nicht-interpolierenden Verfahren erzielten Ergebnissen ein größeres Gebiet von der Isolinie umschlossen wird. Vor allem am südlichen Rand der Kontur in den Abb. 4.1 - 4.4 entstehen solche Auswölbungen. Großskalige Strukturen in den beiden Modellsimulationen unterscheiden sich jedoch nur geringfügig. Aus diesem Grund ist weder die Eulersche, noch die nicht-interpolierende Methode als besser einzustufen. Im südlichen Abschnitt der Linien in den Abb. 4.1 und 4.2 sind nur wenig Daten vorhanden. Im oberen Abschnitt der Tracerwolken in Abb. 4.2 stehen jedoch

4. Anwendungsbeispiele

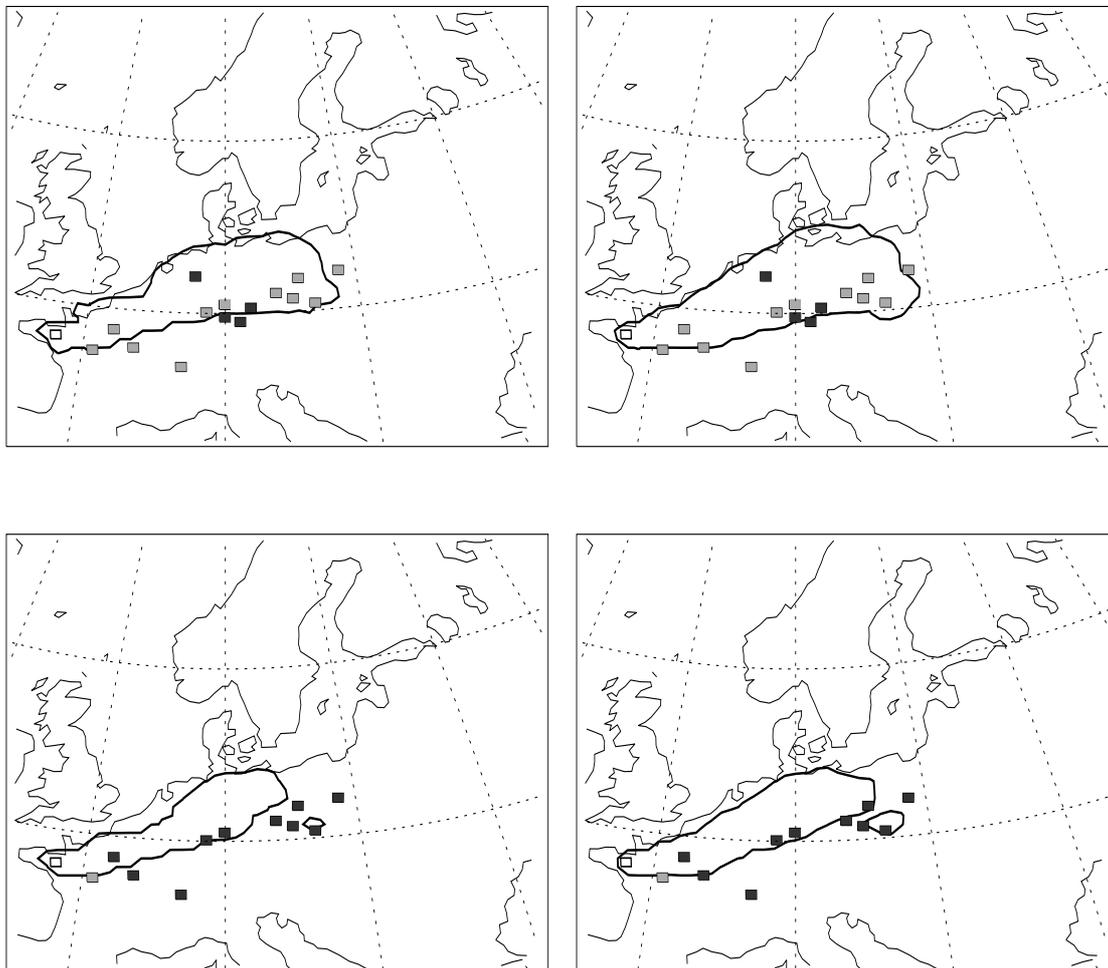


Abbildung 4.5: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung der pmcp-Ausbreitung. Mit Konturlinien wurde die Verteilung der Partialdichte von 10^{-12} kg/m^3 (oben) und 10^{-11} kg/m^3 (unten) dargestellt. Links sind erneut die mit dem Flußverfahren erzielten Ergebnisse, rechts die nicht-interpolierend berechneten Resultate. Die Markierung mit Symbolen entspricht den Angaben der Tabelle 4.2.

Daten in ausreichender Zahl zur Verfügung und rechtfertigen die sich weiter nördlich erstreckenden Konturlinien. In Abb. 4.3 (nach 48 Stunden) wird in beiden Modellstudien ein Phasenunterschied gegenüber den Messungen sichtbar. Sie zeigen eine Ausbreitung nach Süd-Osten an, die in den Simulationen nicht wiedergegeben wird. Erst nach 60 Stunden erfassen auch die Modellrechnungen diese Verlagerung. Besonders für höhere Kon-

4.1. Ausbreitungsrechnungen

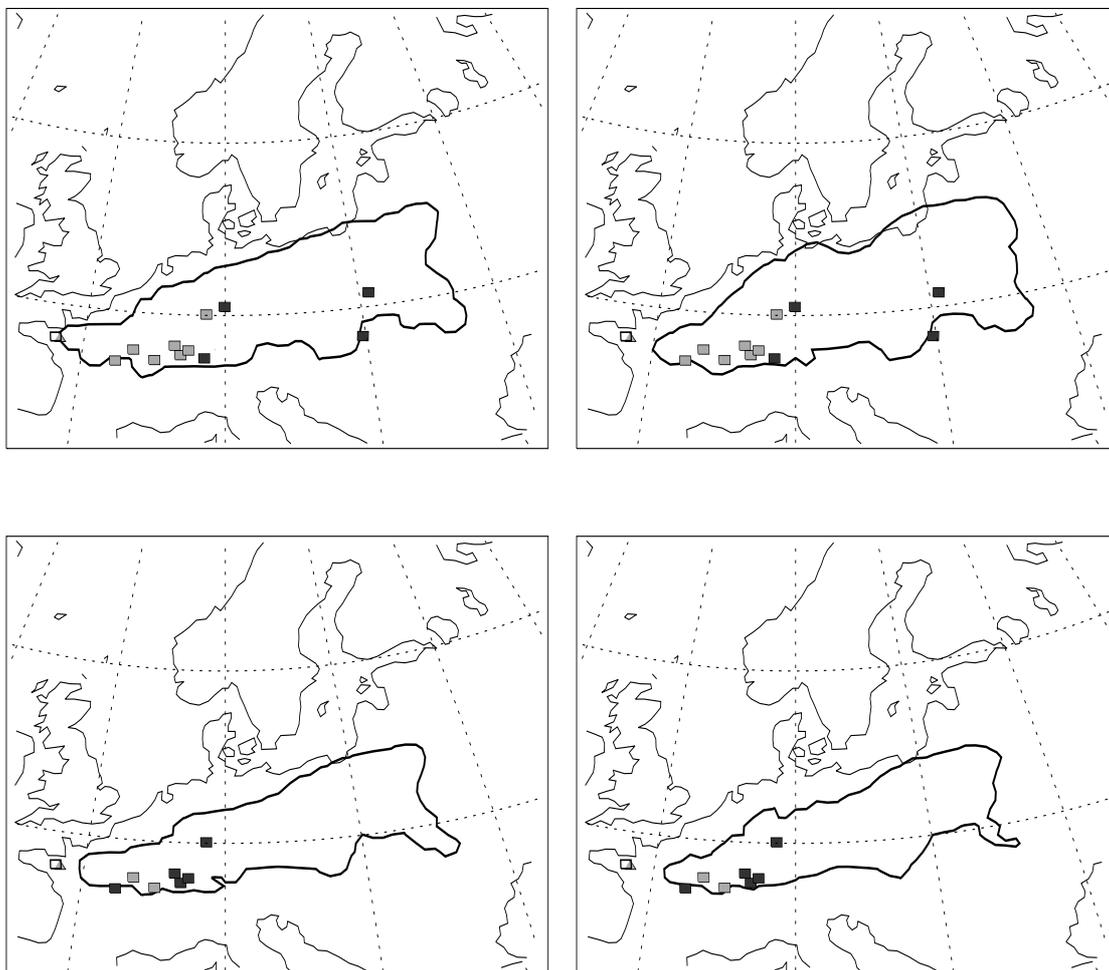


Abbildung 4.6: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung der pmcp-Ausbreitung. Es handelt sich um den selben Modellauf wie bei Abb. 4.5, jedoch nach 36 Stunden.

zentrationen (untere Grafiken) von 10^{-10} kg/m³ liegen in Ost-Europa verwertbare Daten außerhalb des Simulationsgebietes.

Im Falle des Tracers pmcp (siehe Abb. 4.5 - 4.8) ist die vorhandene Datenmenge zu gering, um die Genauigkeit der numerischen Berechnungen zu prüfen. Abb. 4.5 zeigt die Meßorte weit über das Simulationsgebiet hinaus zerstreut. Im späteren Verlauf der Simulation liefern die westlich gelegenen Meßstationen verwertbare Daten, die es ermöglichen, die Lage der simulierten Wolke nach 36 Stunden (dargestellt in Abb. 4.6) bzw. 48

4. Anwendungsbeispiele

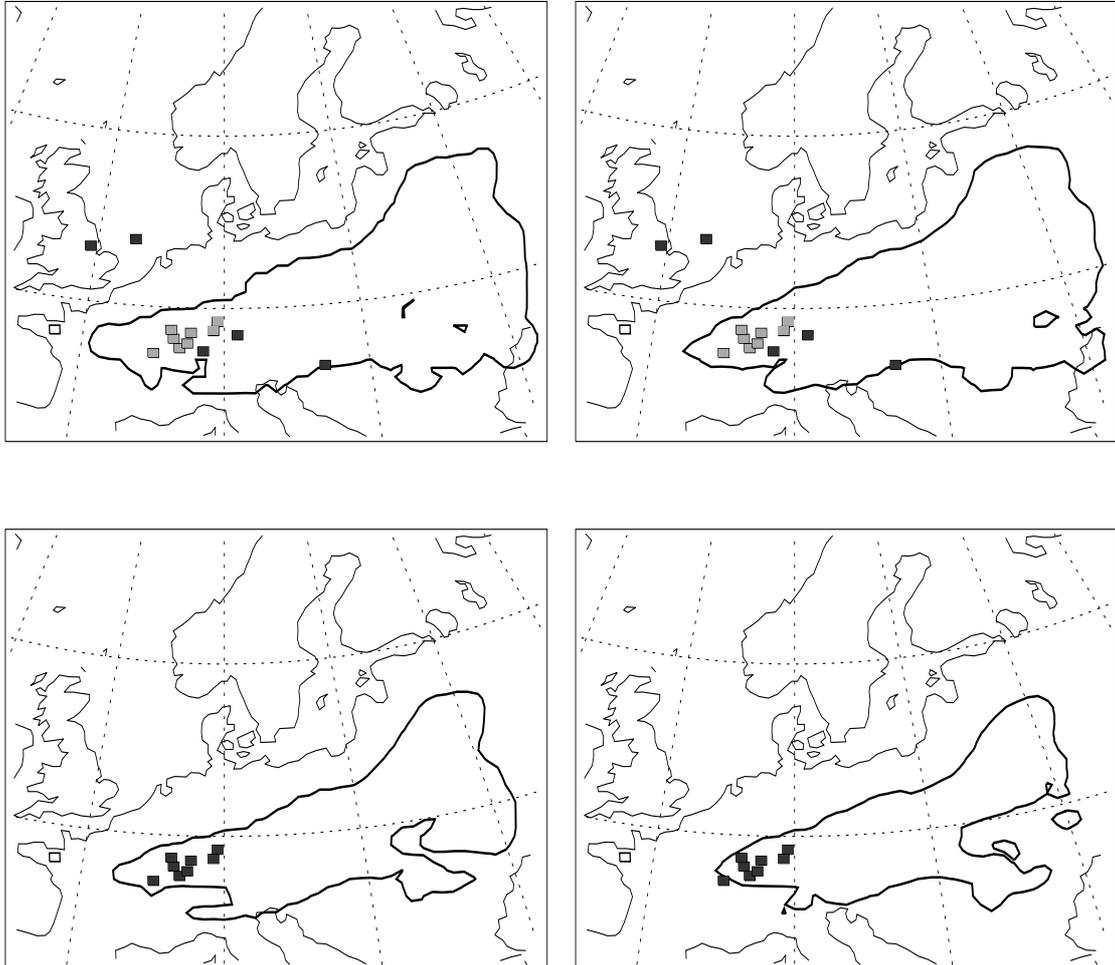


Abbildung 4.7: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung von pmcp-Ausbreitung. Es handelt sich um den selben Modellauf wie bei Abb. 4.6, jedoch nach 48 Stunden.

Stunden (dargestellt in Abb. 4.7) gut zu bestimmen. Zum Zeitpunkt 60 Stunden (in Abb. 4.8 zu sehen) umschließen die Ergebnisse über West-Europa nur noch wenige Meßorte, wobei die links stehende Eulersche Simulation einige Messungen räumlich besser erfaßt. Vergleicht man die beiden Modellrechnungen, so kann man im zweiten Experiment eine gut übereinstimmende Lage und Erstreckung der Konturen bei beiden Modellrechnungen ausmachen. Sie erscheinen sogar in Detailstrukturen gleich. Der südliche und süd-östliche Rand der Wolken erlaubt diesbezügliche Aussagen. Allerdings entwickeln sich diese

4.1. Ausbreitungsrechnungen

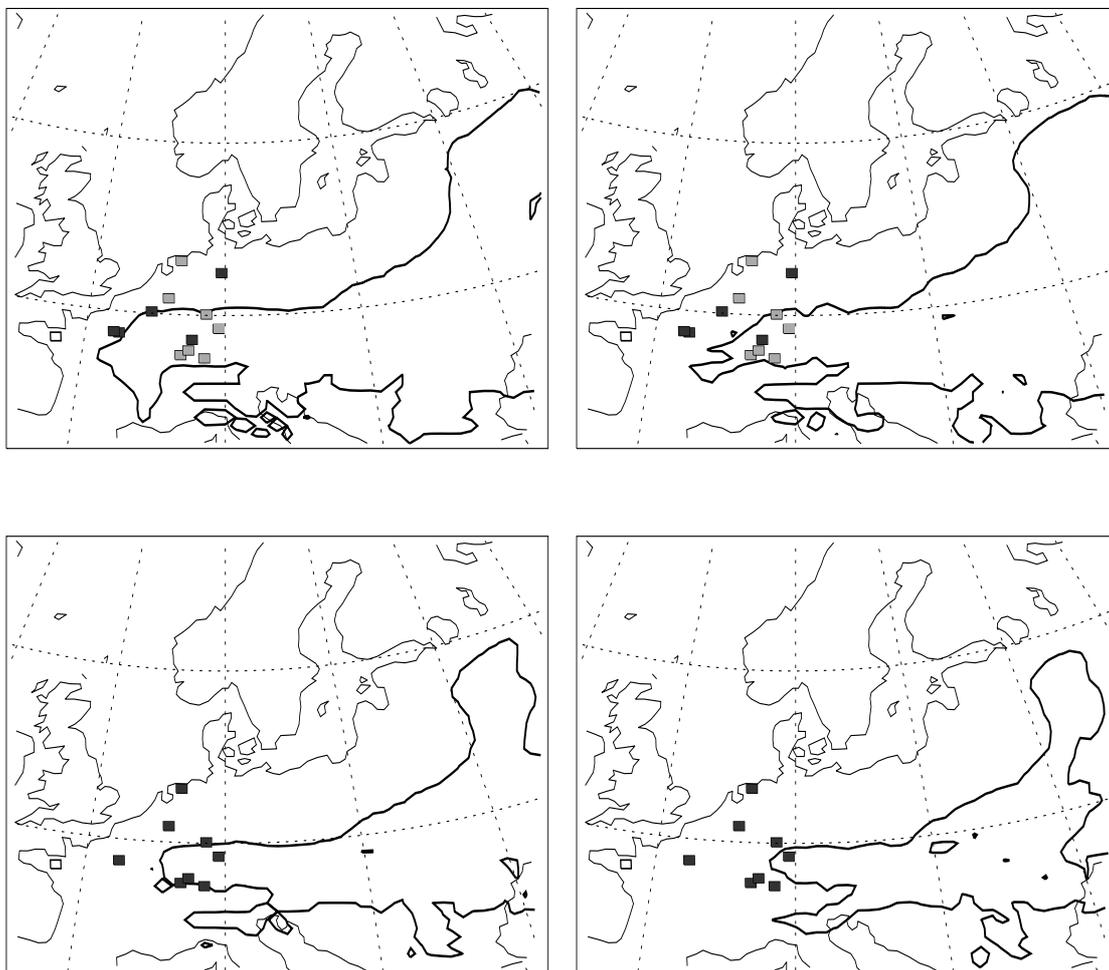


Abbildung 4.8: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der Berechnung von pmcp-Ausbreitung. Es handelt sich um den selben Modellauf wie bei Abb. 4.7, jedoch nach 60 Stunden.

Bereiche nach 48 (Abb. 4.7) und 60 Stunden (Abb. 4.8) in den Einzelheiten auseinander, und ihre Ähnlichkeit bleibt nur über die Tendenz der Änderungen vorhanden, während die oberen, nördlichen und nord-östlichen Passagen weiterhin zum Teil identisch sind.

4. Anwendungsbeispiele

4.2 Anwendung der nicht-interpolierenden Methode zur Simulation trockener und feuchter Konvektion

Nach den barotropen Modellstudien und den Ausbreitungsrechnungen soll nun die Anwendbarkeit der nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Methode am Beispiel eines nicht-hydrostatischen Atmosphärenmodells überprüft werden, in dem die Modellphysik weniger einschränkenden Annahmen unterliegt, als im Falle der Flachwasserdynamik. Der entsprechende physikalische Vorgang, dessen Ablauf maßgeblich durch den Gradienten einer prognostischen Variablen gesteuert wird, und deshalb als Testfall zur Untersuchung von Advektionsmethoden geeignet ist, sei das konvektive Aufsteigen einer tropfenförmigen warmen Luftblase in trockener und feuchter Luft.

Bei großen Gradienten, die insbesondere an der Trennfläche zweier Flüssigkeitsphasen (bzw. -komponenten), aber auch an Temperaturgradienten in einem nicht-hydrostatischen Modell vorhanden sind, ist die numerische Berechnung eines Anfangswert-Problems unter den gleichen Gesichtspunkten zu betrachten, wie z.B. die einfachste Modellstudie der eindimensionalen Advektion mit konstanter Geschwindigkeit, denn die gestellte Aufgabe beeinflusst die Fehlerstruktur der angewandten Näherung nicht. Es wird deshalb erwartet, daß die Berechnung des konvektiven Aufstiegs mit herkömmlichen Lösungsmethoden ähnliche numerische Fehler zu Folge hat, die man in Abb. 2.1 beobachten kann. Dies sind geglättete Gradienten bzw. dispersive Oszillationen an solchen Gradienten, die selbst dann nicht völlig zu vermeiden sind, wenn die Diskretisierung feiner wird. Da diese Näherungsfehler z.B. durch die Analyse von Haltiner & Williams (1980) hinreichend bekannt sind, wird die nicht-interpolierende numerische Lösung einem qualitativen Vergleich mit der interpolierenden Lagrangeschen numerischen Lösung, sowie mit einer durch zentrierte finite Differenzen in der lokalen Betrachtung errechneten numerischen Lösung unterworfen.

4.2. Konvektionsexperimente

4.2.1 Das dynamische Modell

Die numerischen Modellstudien werden in einer nicht-hydrostatischen Modellatmosphäre durchgeführt. Deren prognostisches Gleichungssystem, in dem im Gegensatz zur Formulierung von Robert (1993) die potentielle Temperatur Θ und die EXNER-Funktion $\pi = (p/p_0)^{R/c_p} = T/\Theta$ als prognostische Variablen auftreten, lautet in der Formulierung von Wippermann (1981)

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -c_p \Theta \frac{\partial \pi}{\partial x} \\ \dot{w} &= -c_p \Theta \frac{\partial \pi}{\partial z} - g \\ \dot{\Theta} &= 0 \\ \dot{\pi} &= (1 - \kappa) \pi \nabla \cdot \mathbf{v},\end{aligned}\tag{4.5}$$

wobei die konstanten Größen $p_0 = 1000$ hPa den Referenzdruck, $c_v = 717$ JK⁻¹kg⁻¹ die spezifische Wärme bei konstantem Volumen, $R = 287$ JK⁻¹kg⁻¹ die Gaskonstante der trockenen Luft, $c_p = R + c_v = 1004$ JK⁻¹kg⁻¹ die spezifische Wärme bei konstantem Druck bedeuten und $\kappa = c_p/c_v$ bezeichnet. Der CORIOLIS-Effekt wurde, wie bei Doms & Herbert (1985), vernachlässigt, weil die Zeitskala der CORIOLIS-Beschleunigung viel größer ist, als die der vom vertikalen Aufsteigen geprägten lokalen Beschleunigung.

Nicht-konvektive Transportprozesse werden im Modell nicht betrachtet. Ebenso werden keine orographischen Erhebungen als untere Randbedingung vorgegeben.

Die Lösung von (4.5) verwendet im Gegensatz zu Grabowski & Smolarkiewicz (1990), Hólm (1995), Pellerin *et al.* (1995) und Margolin *et al.* (1997) weder die divergenzfreie (inkompressible) noch die anelastische Näherung, weil dann der Druck, bzw. die EXNER-Funktion keine prognostischen, sondern nur noch diagnostische Größen sind und ihre Werte über die Lösung einer elliptischen Gleichung ermittelt werden müssen. Obwohl heutige numerische Methoden z.B. von Skamarock *et al.* (1997) und Smolarkiewicz *et al.* (1997) solche elliptischen Aufgaben mit hinreichender Genauigkeit und Effizienz berechnen, wurden die Konvektionsexperimente ausschließlich mit dem originären ungefilterten System (4.5) durchgeführt.

Wolkenphysikalische Prozesse werden bezüglich Kondensation und Verdunstung approximativ nach der Methode der Sättigungsadjustierung berücksichtigt. Nukleations- und Sedimentationsprozesse werden vernachlässigt, Wasser soll im Luftvolumen bleiben (Doms & Herbert, 1985).

4. Anwendungsbeispiele

Zur Beschreibung von Zustandsänderungen des Systems Wolkenluft (definiert als Gasgemisch trockene Luft Wasserdampf), worin Wassertropfen suspendiert sind, ist folgendes Gleichungssystem anstelle von (4.5) zu lösen:

$$\begin{aligned}
 \dot{u} &= -c_p \Theta \frac{\partial \pi}{\partial x} \\
 \dot{w} &= -c_p \Theta \frac{\partial \pi}{\partial z} - g \\
 \dot{\pi} &= (1 - \kappa) \pi \left[\nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{\dot{\Theta}}{\Theta} \right] \\
 \dot{\Theta} &= \frac{L_c}{c_p} \frac{\Theta}{T} C_d \\
 \dot{q}_v &= -C_d \\
 \dot{q}_c &= C_d .
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

L_c bedeutet die latente Wärme der Phasenumwandlung, C_d die Kondensationsrate und q_v und q_c den Massenbruch des Wasserdampfes und des Wolkenwassers. Nukleationseffekte werden ebenfalls in C_d erfaßt und im folgenden nicht mehr erwähnt. Um die Wechselwirkung zwischen Θ , q_v und q_c beobachten zu können, wird π in (4.6) nicht adjustiert und deshalb die prognostische Gleichung von π in der Form wie in (4.5) verwendet.

Das Advektions-Kondensations-Problem (4.6) wird in zwei Schritten gelöst. Ausgehend von den Anfangsbedingungen $(u, w, \pi, \Theta, q_v, q_c)^n$ zum Zeitpunkt $t = n \cdot \Delta t$ wird die physikalische Entwicklung zunächst ohne Wasserphasen betrachtet, das heißt, man integriert (4.5) als Spezialfall vom (4.6), indem darin $C_d = 0$ (keine Kondensation) angenommen wird. Für diesen kondensationsfreien Zustand resultiert die Lösung $(u, w, \pi, \Theta, q_v, q_c)$, wobei (Θ, q_v, q_c) vorläufige Werte und sie deshalb noch unter Berücksichtigung des Kondensationseffektes endgültig zu bestimmen sind. Sodann wird Sättigung als Modellprozess vorausgesetzt. Das heißt die Werte $(\Theta, q_v, q_c)^{n+1}$ werden festgelegt, indem die Stoffbedingungen

$$\begin{aligned}
 q_v &= q_{vs} \quad \text{wenn } q_c > 0 \\
 q_c &= 0 \quad \text{wenn } q_v < q_{vs} ,
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

sowie die Temperaturdifferenz

$$\Delta \Theta = \frac{L_c}{c_p} \frac{\Theta}{T} C_d \Delta t = -\frac{L_c}{c_p} \frac{\Theta}{T} \Delta q_v \tag{4.8}$$

berücksichtigt werden, wobei Δq_v in (4.8) mit Hilfe der Definition

$$q_v^{n+1} = q_v^* + \Delta q_v = q_{vs} (\Theta^{n+1}) = q_{vs} (\Theta^* + \Delta \Theta) \tag{4.9}$$

4.2. Konvektionsexperimente

bestimmt wird (q_{vs} bedeutet den Sättigungswert für q_v). In (4.7) und (4.9) wurde der von T und p unabhängige Sättigungswert q_{vs} als eine Funktion der potentiellen Temperatur angesetzt. Man führt nun eine TAYLOR-Entwicklung von q_{vs} um die bekannte potentielle Temperatur Θ^* bis zum Term erster Ordnung aus

$$q_{vs}^{n+1} = q_{vs}(\Theta^{n+1}) = q_{vs}(\Theta^* + \Delta\Theta) \approx q_{vs}(\Theta^*) + \left(\frac{\partial q_{vs}}{\partial \Theta} \right)_* \Delta\Theta. \quad (4.10)$$

Aus (4.8), (4.9) und (4.10) folgt die umzuwandelnde Wasserdampfmenge in Abhängigkeit von gegebenen *-Werten

$$\Delta q_v \approx \frac{q_{vs}(\Theta^*) - q_v^*}{1 + \frac{L_c}{c_p} \frac{\Theta}{T} \left(\frac{\partial q_{vs}}{\partial \Theta} \right)_*}. \quad (4.11)$$

Dabei ist die partielle Ableitung im mit * bezeichneten Zustand gegeben durch

$$\left(\frac{\partial q_{vs}}{\partial \Theta} \right)_* = \frac{\partial q_{vs}}{\partial e_s} \frac{\partial e_s}{\partial T} \left(\frac{\partial T}{\partial \Theta} \right)_*, \quad (4.12)$$

wobei der erste Term aus der Näherungsformel $q_{vs}^* \approx 0,622 \cdot e_s/p$, der zweite aus der CLAUDIUS-CLAPEYRONschen Gleichung berechnet wird. Schließlich resultiert für Δq_v

$$\Delta q_v \approx \frac{q_{vs}(\Theta^*) - q_v^*}{1 + \frac{L_c^2 q_{vs}(\Theta^*)}{c_p R_v T^{*2}}}, \quad (4.13)$$

wobei R_v die Gaskonstante des Wasserdampfes ist.

4.2.2 Numerische Lösungsmethoden

Die zu vergleichenden Lösungsprozeduren für (4.5) unterscheiden sich in der Diskretisierung der linken Seiten. Für die rechten Seiten wird bei jeder Modellkonfiguration in gleicher Weise das um eine halbe Maschenweite versetzte C-Gitter nach Arakawa & Lamb (1981) verwendet. Dieses quadratische, kartesische Gitter von $M_x \cdot M_z$ Punkten wird mit den konstanten Maschenweiten Δx und Δz definiert. Somit gilt für jeden (x_i, z_k) Gitterpunkt $\{(x_i, z_k) : x_i = i \cdot \Delta x, z_k = k \cdot \Delta z\}$. Die Zeitintegration erfolgt mit dem split-expliziten Verfahren. Verschiedene Varianten des split-expliziten Verfahrens werden in den Arbeiten von Gadd (1978), Haltiner & Williams (1980) Klemp & Wilhelmson (1978), Purser & Leslie (1991b), Skamarock & Klemp (1992), Browning &

4. Anwendungsbeispiele

Kreiss (1994), Skamarock & Klemp (1994) und Wicker & Skamarock (1998) diskutiert. Bei der split-expliziten Zeitintegration handelt es sich um eine Methode, die die prognostischen Größen zum Zeitpunkt $(n + 1) \cdot \Delta t$ nur aus den Werten zum Zeitpunkt $n \cdot \Delta t$ berechnet. Deshalb tritt kein sog. computational mode in der numerischen Lösung auf.

Im Gegensatz zu semi-impliziten Integrationsmethoden, wie z.B. bei Bonaventura (2000), der die Präsenz orographischer Erhebungen im kartesischen Koordinaten-System (anstelle einer geländefolgenden Vertikalkoordinate) berücksichtigt, wird man der Stabilitätsbedingung im Falle der split-expliziten Integration nicht dadurch gerecht, daß man die Phasengeschwindigkeit der sich schnell ausbreitenden Schall- und Schwerewellen künstlich verlangsamt. Der Präsenz unterschiedlicher Zeitskalen im dynamischen System wird mit unterschiedlich langen Zeitschritten Rechnung getragen. Somit gestaltet sich der Integrationsschritt im Falle der Eulerschen, sowie der interpolierenden und nicht-interpolierenden Lagrangeschen numerischen Lösung wie folgt:

- Eulersche Behandlung der Advektion: zunächst werden die Advektionstendenzen in der Mitte des Zeitintervalls ausgerechnet. Dieses geschieht in zwei Stufen. Als erstes entwickelt man die zu advehierenden Felder $\psi = (u, w, \pi, \Theta)$, wie dies bei Press *et al.* (1992) und Haltiner & Williams (1980) beschrieben wird, mit Hilfe der Eulerschen Vorwärtsintegration über einen halben Zeitschritt

$$\psi^{n+1/2} = \overline{\psi^n}^{x,z} - (\mathbf{v} \cdot \nabla \psi)^n \cdot \Delta t / 2, \quad (4.14)$$

wobei der Anfangszustand aus Stabilitätsgründen räumlich gemittelt berücksichtigt werden muß. Die Mittelung wird mit Querstrich angedeutet. Danach folgt im Sinne eines zeitlich zentrierten Schrittes (2.27) die Berechnung der Advektionstendenzen

$$\delta \psi = -(\mathbf{v} \cdot \nabla \psi)^{n+1/2}. \quad (4.15)$$

Die potentielle Temperatur Θ besitzt in (4.5) keine Quellterme, weshalb für diese Größe die Integration bereits abgeschlossen ist: $\Theta^{n+1} = \Theta^n + \delta \Theta \cdot \Delta t$. Für (u, w, π) benötigt man zusätzlich die iterative Berechnung der rechten Seiten über die kleinen Zeitschritte $\Delta t_s = \Delta t / K$, wobei $K=5$ die Anzahl der durchzuführenden Iterationsschritte bedeutet. Damit lautet die split-explizite Methode im Iterationsschritt $k \in [1, K]$

$$\begin{aligned} \pi^{k+1} &= \pi^n + \left[\delta \pi + (1 - \kappa) \pi^k \nabla \cdot \mathbf{v}^k \right] \cdot \Delta t_s \\ u^{k+1} &= u^n + \left[\delta u \quad - c_p \Theta \frac{\partial \pi^{k+1}}{\partial x} \right] \cdot \Delta t_s \end{aligned} \quad (4.16)$$

4.2. Konvektionsexperimente

$$w^{k+1} = w^n + \left[\delta w \quad -g - c_p \Theta \frac{\partial \pi^{k+1}}{\partial z} \right] \cdot \Delta t_s ,$$

womit man bei $k = K$ den Zustand $(n + 1) \cdot \Delta t$ erreicht.

- Interpolierende semi-Lagrangesche Methode der Advektion: die Implementierung der interpolierenden Lagrangeschen Advektionsmethode erfolgt mit denselben Programmmodulen wie im Eulerschen Modell. Lediglich werden zur Bestimmung der Herkunft von Trajektorien, die an Gitterpunkten enden, bzw. zur Interpolation der Feldwerte zwischen benachbarten Gitterpunkten neue Unterprogramme benutzt. Somit gestaltet sich die Lagrangesche Integration von (4.5) in folgender Weise. Der Eulersche Vorwärtsschritt über $\Delta t/2$,

$$\psi^{n+1/2} = \overline{\psi^n}^{x,z} - (\mathbf{v} \cdot \nabla \psi)^n \cdot \Delta t/2 , \quad (4.17)$$

umfaßt diesmal nur die Geschwindigkeitskomponenten u und w ³. Danach findet die Bestimmung des Anfangspunktes für jede Trajektorie statt, wobei jeder der an verschiedenen Orten definierten Variablen eine eigene Trajektorie im räumlich versetzten C-Gitter zugeordnet wird. Die iterative Rechenprozedur löst (2.43) (siehe auch (3.3) mit negativen Vorzeichen für die Ortskoordinaten) für den Anfangspunkt $(\tilde{x}, \tilde{z}) \in [x_i, x_{i+1}] \times [z_k, z_{k+1}]$. Die Interpolation wird mit dem zweidimensionalen Lagrangeschen Interpolationspolynom dritter Ordnung berechnet (Press *et al.*, 1992). Damit erhält man die Advektion für $\psi = (u, w, \pi, \Theta)$ als $\psi(t + \Delta t, x_i, z_k) = \psi(t, \tilde{x}, \tilde{z})$. Der gesuchte Wert der potentiellen Temperatur Θ ist an diesem Punkt der Lösungsprozedur bestimmt. Für die Variablen u, w, π wird zunächst die Wirkung der Advektion $\delta \psi = \psi(t + \Delta t, x_i, z_k) - \psi(t, \tilde{x}, \tilde{z})$ berechnet und dann mit dem Verfahren der kleinen Zeitschritte (4.16) (Haltiner & Williams, 1980) die rechten Seiten von (4.5) ermittelt. Alternative Möglichkeit für interpolierende Methoden zur Übertragung des Feldes vom Lagrangeschen ins Eulersche Gitter wurden von Purser & Leslie (1991a), Sun & Yeh (1997) und Nair *et al.* (1999) entwickelt.

- Nicht-interpolierende semi-Lagrangesche Methode der Advektion

Die nicht-interpolierende Methode wird auf einem hybriden Gitter implementiert. Das heißt, die Variablen u, w und π werden weiterhin entweder mit den zentrierten Eulerschen Differenzen oder interpolierend advehiert und die beweglichen Lagrangeschen Gitterpunkte $\{\hat{X}, \hat{Z}\}$ werden nur für die potentielle Temperatur eingesetzt.

³Wicker & Skamarock (1998) diskutieren die Notwendigkeit des Einbeziehens von Schall- und Schwellentermen in die Bestimmung von $\psi^{n+1/2}$. Auf der Zeitskala der durchgeführten Konvektionsexperimente wurde kein Unterschied zu den Ergebnissen beobachtet, in denen (4.17) auch für π berechnet wird.

4. Anwendungsbeispiele

Die Anwendung der beweglichen Gitterpunkte findet in engem Zusammenhang mit dem räumlich eindimensionalen Verfahren des Kapitels 3 statt. Die Projektion und die Gitterglättung geschehen auf der Basis der zweidimensionalen Erweiterung der im Kapitel 3 erläuterten Methoden. Der Unterschied zum barotropen Modell besteht einzig darin, daß die programmtechnische Verwaltung der beweglichen Punkte über einen in Partikelverfahren üblichen binären Baum geschieht, dessen Tiefe und Breite sich dynamisch ändert. Durch diese Möglichkeit hat sich im Laufe der Konvektionsexperimente als vorteilhaft herausgestellt, während der Integration über die anfangs geltende eindeutige Zuordnung zwischen den Lagrangeschen und Eulerschen Gittern hinaus mehrere Partikel in einem festen Gitterintervall zuzulassen. Die Anzahl der Partikel wurde jedoch auf höchstens 4 in einem festen Intervall beschränkt. Gleichzeitig war es notwendig, darauf zu achten, daß sie innerhalb des Eulerschen, festen Intervalls alle in einem anderen Quadranten der Gitterbox stehen, andernfalls griff die im Kapitel 3 erläuterte Gitterglättung ein. Zweitens mußte Sorge getragen werden, daß kein festes Intervall zu Beginn eines Zeitschrittes wegen der Konvergenz in anderen Bereichen ohne bewegliche Punkte bleibt. Auf diese Weise läßt sich eine Art adaptives Gitter schaffen, welches sich automatisch dort verfeinert, wo Konvergenz das Feld aufräut. Da die Geschwindigkeitsverteilung dieses in erster Linie aus den Unterschieden in der potentiellen Temperatur heraus tut, wird das Gitter dem Gradienten von Θ angepasst.

Für die Zeitintegration wird der halbe Zeitschritt zum Mittelpunkt der Zeitebene ausgeführt. Bei Advektion der Variablen $\psi = (u, w, \pi)$ mit zentrierten Eulerschen Differenzen werden alle 3 Variablen vorwärts entwickelt, bei der interpolierenden Lagrangeschen Methode nur die Geschwindigkeitskomponenten (u, w) . Danach wird mit der zweidimensionalen Form von (3.3) und der Geschwindigkeit (u, w) der neue Endpunkt aller Trajektorien ausgerechnet, gefolgt von der Projektion der im beweglichen Gitter $\{\hat{X}, \hat{Z}\}$ definierten Amplituden $\{\hat{\Theta}\}$ auf das feste Eulersche Gitter $\{x_i, z_k\}$, um in der iterativen Prozedur der kleinen Zeitschritte (4.16) die rechten Seiten von (4.5) zu bestimmen.

4.2.3 Ergebnisse der Modellvergleiche für trockene Konvektion

Im trockenadiabatischen Modell (4.5) enthält die prognostische Gleichung der potentiellen Temperatur keine Quellterme. Das heißt, daß die potentielle Temperatur Θ eine konservative Größe ist und deshalb alle Werte erhalten werden müssen. Eine solche Genauigkeit läßt sich während der numerischen Integration von (4.5) nicht erreichen. Im

4.2. Konvektionsexperimente

Rahmen der zu erzielenden Genauigkeit wird jedoch erwartet, daß weder kleinere Werte als der anfangs kleinste, noch größere als der anfangs größte Wert von Θ , vorkommen dürfen. Somit gilt $\min\{\Theta(t = 0, x, z)\} \leq \Theta(t, x, z) \leq \max\{\Theta(t = 0, x, z)\}$, $t > 0$, $\forall x, z$. Werden nun die Anfangsbedingungen entsprechend der Kastenfunktion der Abb. 2.1 gewählt, eignet sich (4.5) zur Überprüfung der Monotonität einer Methode. Durch die Verteilung von Θ ist nämlich die Möglichkeit gegeben, im Rahmen der von (4.5) beschriebenen trockenadiabatischen Prozesse die Bewegung eines frontartigen Gradienten von kalter zu warmer Luft, ähnlich zur Abb. 2.1, zu untersuchen.

Über die Entwicklung des Temperaturverlaufes am Übergang zwischen Minimum und Maximum ist zunächst nur so viel bekannt, daß unter inkompressiblen Bedingungen die Form des Gradienten entlang der Normalen erhalten bleiben müßte, weil die Flüssigkeitsteilchen sich nicht zueinander bewegen und die eingeschlossene Warmluft ihr Volumen erhält. Im Falle von (4.5) handelt es sich jedoch um ein elastisches System, worin der Abstand zwischen der eingeschlossenen Warmluft und der Umgebungsluft zur Berechnung des Gradienten verschieden sein darf.

Die Abb. 4.9 - 4.11 zeigen die Entwicklung der potentiellen Temperatur für die Eulersche numerische Lösung, sowie die interpolierenden Lagrangeschen und nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen numerischen Lösungen, die auf einem Rechengitter von $M_x \cdot M_z = 100 \cdot 100$ Punkten mit den Maschenweiten $\Delta x = \Delta z = 50$ m und dem Zeitschritt $\Delta t = 0,2$ s berechnet werden. Die iterative Berechnung der rechten Seiten von (4.5) gemäß der forward-backward Methode (4.16) erfolgte mit dem reduzierten Zeitschritt von $\Delta t_s = \Delta t/5$. Im Anfangszustand ist die Atmosphäre quasi-hydrostatisch und mit $\Theta = 290$ K thermisch neutral geschichtet. Die kreisförmige warme Luftblase mit $\Theta = 295$ K wurde als Störung am Gitterpunkt (50,30) mit einem Radius von $15 \cdot \Delta x$ dem Anfangszustand überlagert. Die Konturlinien von $\Theta = 291, 292, 293, 294, 295$ K wurden mit verschiedenen Graustufen dargestellt. Die dunkelste Schattierung entspricht dem Bereich $\Theta \geq 295$ K.

An der Eulerschen Lösung mit den zentrierten finiten Differenzen in Abb. 4.9 sind die angesprochenen Oszillationen um das sich nach oben bewegende Gebilde herum deutlich sichtbar. Im Inneren der Luftblase setzen sich die Oszillationen fort und erzeugen unphysikalische Werte der potentiellen Temperatur von über 295 K. Somit bedeutet der zusammenhängend erscheinende, dunkel schattierte innere Bereich der Luftblase zumeist höhere Θ -Werte als 295 K. Die obere Außenkontur in jeder einzelnen Graphik ist im Vergleich zum unteren Schweif, der auf dem Gitter als kleinskaliger, hochfrequenter Lärm auftritt, relativ glatt. Die typische Wellenlänge des Lärms beträgt $(2 - 3) \cdot \Delta x$.

Die Steigerung der Genauigkeit durch Anwendung der interpolierenden semi-Lag-

4. Anwendungsbeispiele

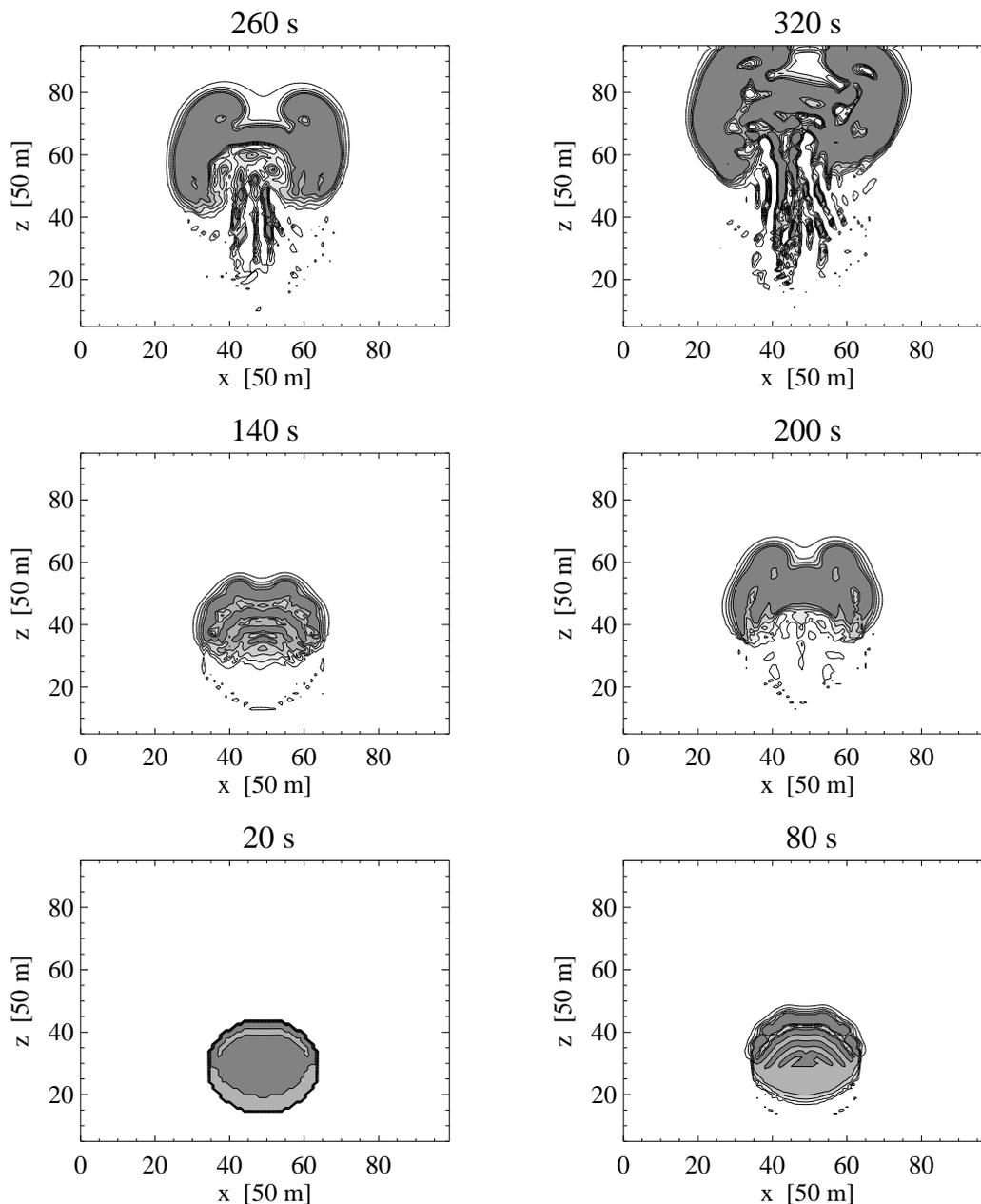


Abbildung 4.9: Dargestellt ist die Entwicklung des Feldes der potentiellen Temperatur Θ . Eine in kalter Umgebung von 290 K isolierte Warmluftblase von 295 K steigt adiabatisch auf. Die dunkler werdenden Graustufen markieren die Bereiche zwischen den Isolinien 291, 292, 293, 294, 295 K. Die Abbildung zeigt die Simulation mit Eulerschen zentrierten Differenzen. Die für dieses Verfahren charakteristischen starken Überschüsse im Inneren der Warmluftblase wurden nicht durch zusätzliche Isolinien markiert.

4.2. Konvektionsexperimente

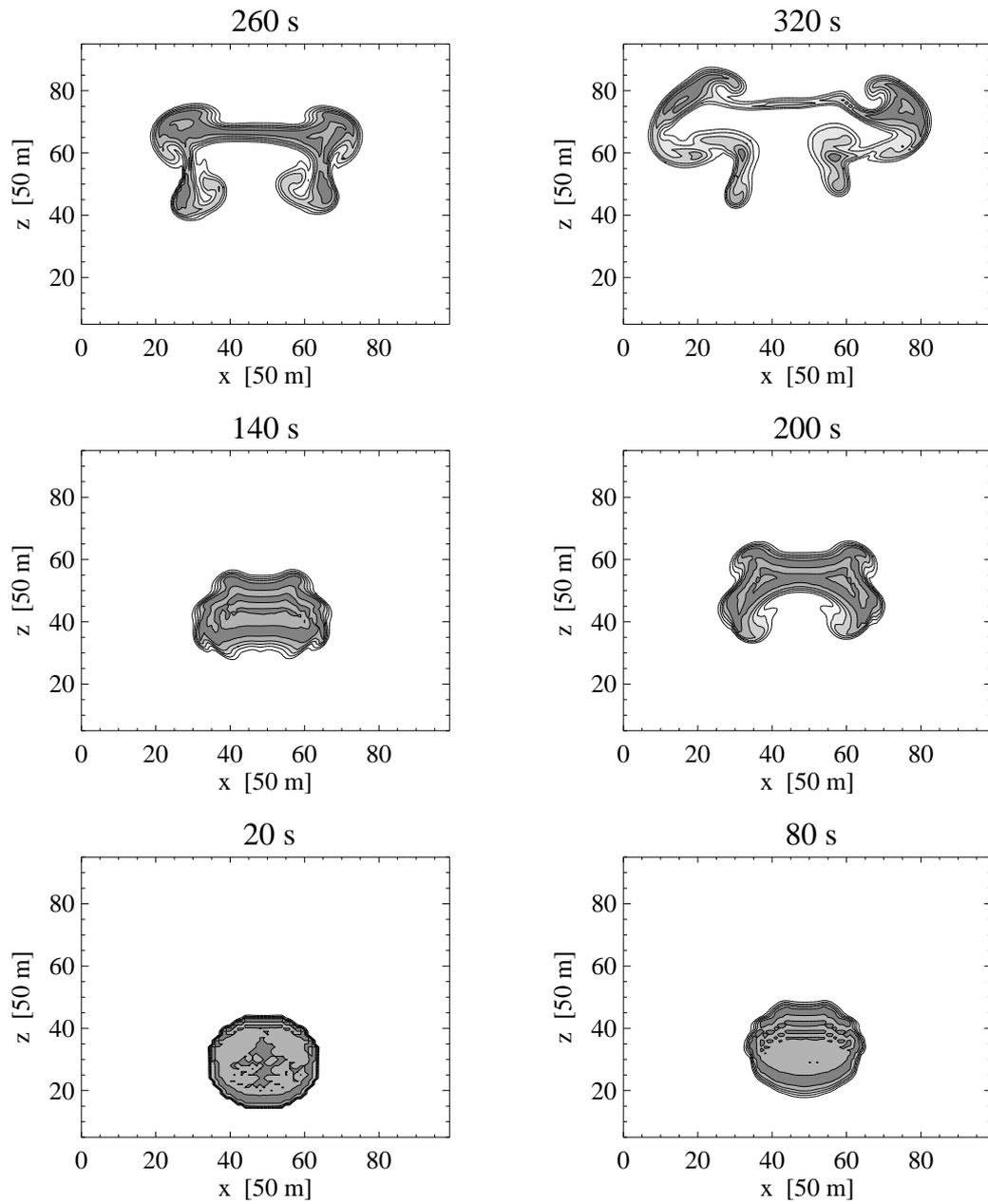


Abbildung 4.10: Wie Abb. 4.9, jedoch mit der interpolierenden Lagrangeschen Methode.

4. Anwendungsbeispiele

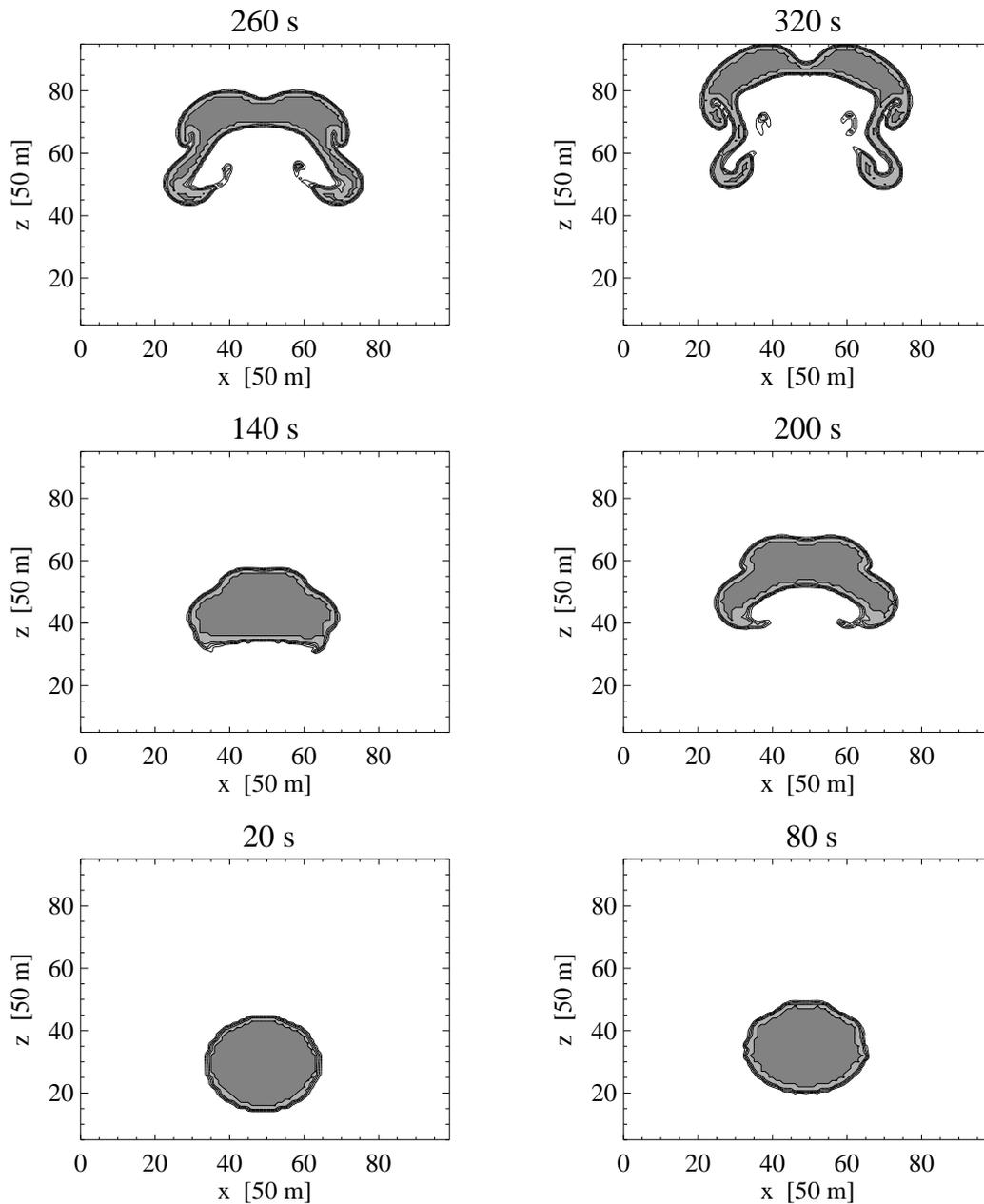


Abbildung 4.11: Wie Abb. 4.9, jedoch mit der nicht-interpolierenden Lagrangeschen Methode (Partikelverfahren). Die Resultate zeigen keine Oszillationen, die Isolinien von Θ verlaufen eng beieinander. Durch Schattierung können nur die Werte 294 K und 295 K unterschieden werden, andere Gradienten bleiben innerhalb der Zeichnungsgenauigkeit.

4.2. Konvektionsexperimente

rangeschen numerischen Lösung statt der Eulerschen numerischen Lösung mit zentrierten Differenzen ist in der Abb. 4.10 deutlich sichtbar. Die Luftblase bleibt während des Aufstiegs kompakter, die Oszillationen auf der kleinen Skala sind weniger ausgeprägt. An der Außenkontur bilden sich kleine Strukturen, die bereits nach 80 s erscheinen und nach 140 s die Berandung des Gebildes klar bestimmen. Ähnliche Phänomene sind bei Grabowski & Clark (1985) und bei Pellerin *et al.* (1995) als kleine, sich seitlich abrollende, KELVIN-HELMHOLTZsche Wirbel identifiziert worden.

An den späteren Entwicklungsphasen der Warmluftblase nach 200 s und 260 s läßt sich im unteren Bereich eine Einfädung erkennen. Noch weiter in der Zeit vorangeschritten breitet sich das Gebilde horizontal aus und am Gebietsrand beeinflussen Fehler das Θ -Feld. Gleichzeitig verschmälert sich die Verbindung zwischen den beiden Augen der Luftblase, bis die Auflösung des Gitters am immer dünner werdenden Strang erreicht ist.

Weitere Verbesserung der Ergebnisse wurde durch die nicht-interpolierende Partikel-Lagrangesche numerische Lösung erzielt, die in Abb. 4.11 dargestellt ist. Solche Oszillationen, die in Abb. 4.9 auftreten, sind diesmal weder an der äußeren Berandung, noch im Inneren der Luftblase zu verzeichnen. Eine Unterscheidung der Isolinien ist nur zwischen $\Theta = 294$ K und $\Theta = 295$ K möglich, unterhalb von $\Theta = 294$ K jedoch nicht mehr. Im Gegensatz zur interpolierenden Methode (Abb. 4.10) treten die äußeren Wirbel zunächst weniger strukturiert auf. Es sind die großskaligen Strukturen, die die Pilzform der Luftblase im Laufe der Integration bestimmen. Allerdings entwickeln sich die unteren Arme in diesem Fall am feinsten. Sie bleiben sogar auch zu einem späteren Zeitpunkt ($t=320$ s) bis zur Konturlinie von $\Theta = 294$ K klar aufgelöst. Auch sind die Randeffekte weniger stark ausgeprägt und das Gebilde bleibt fast vollständig symmetrisch. Den maßgeblichen Unterschied zur interpolierenden Methode über die angestrebte Monotonität hinaus stellen die fehlenden kleinskaligen Wirbel an der oberen Berandung dar. Stattdessen bleiben größerskalige Verwirbelungen über längere Zeit und in besserer Auflösung erhalten.

4.2.4 Ergebnisse der Modellvergleiche für feuchte Konvektion

Das nicht-hydrostatische Modell für trockenadiabatischen Prozesse soll nun dahingehend erweitert werden, daß das Luftpaket neben trockener Luft auch H_2O in Form von Wasserdampf und Wasser enthalten soll und Phasenumwandlungen zugelassen werden. Es wird dabei angenommen, daß die Tröpfchen mit dem Luftpaket transportiert werden und nicht ausfallen. Man bezeichnet das Kondensat deshalb als Wolkenwasser.

Durch Einbeziehen von Phasenumwandlungen soll untersucht werden, ob in der nu-

4. Anwendungsbeispiele

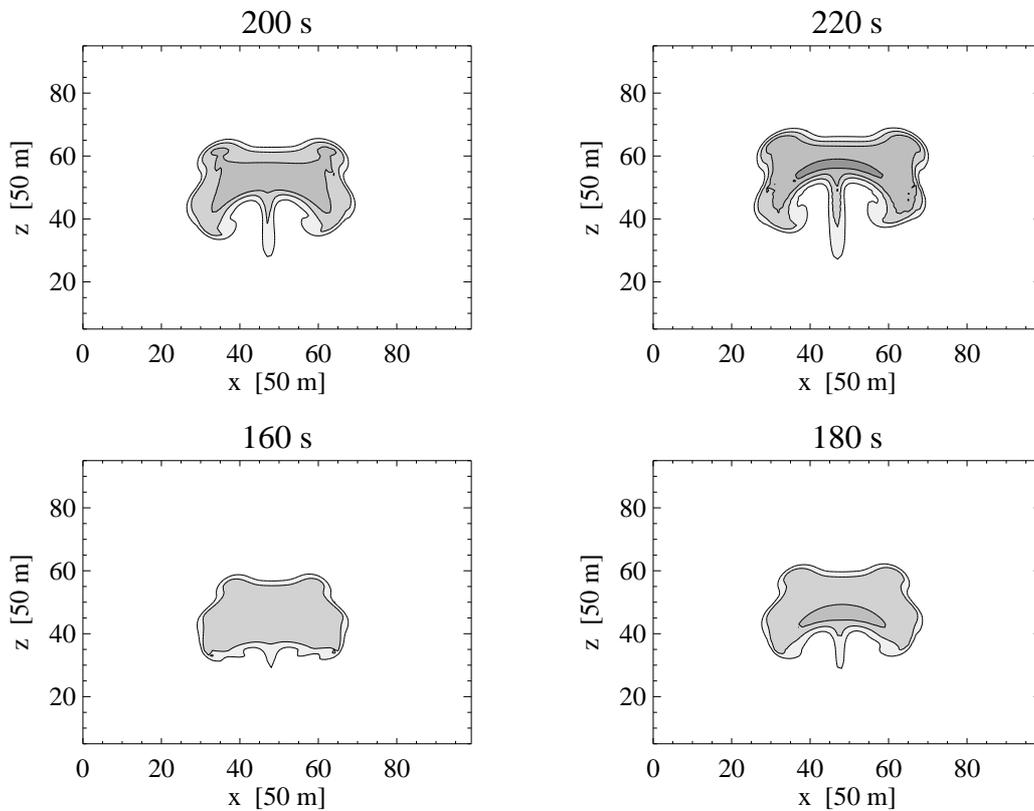


Abbildung 4.12: Dargestellt ist das Aufsteigen des warmen Lufttropfens in feuchter Umgebung. Die Simulation wurde mit der interpolierenden Lagrangeschen Methode durchgeführt. Die Grafiken zeigen die Verteilung der potentiellen Temperatur Θ , nachdem Phasenumwandlung bereits stattfindet. Die Isolinien markieren Werte von 292, 294, 296, 298, 300 K.

merischen Lösung der Modellgleichungen die einzeln monoton advehierten Felder auch nach der Wechselwirkung durch die Phasenumwandlung positiv und monoton bleiben. Diese Frage stellt sich nicht nur wegen der Tatsache, daß die Lösung der Bilanzgleichungen (2.4), in denen der Index n z.B. die verschiedenen H_2O -Phasen andeutet, nur auf Grund der physikalischen Nebenbedingung $\sum_n r_n = 0$ die Positivität der Größen q_n gewährt. Aus den Ergebnissen von Grabowski & Smolarkiewicz (1990) ist zu schließen, daß außer der Positivität und im allgemeinen auch der Monotonität von mehreren gleichzeitig (numerisch) advehierten Größen auch die Bedingung der *Kompatibilität* der Größen untereinander zu erfüllen ist. Bisher wurde dieses Kriterium von Schär & Smolarkiewicz (1996), VanderHeyden & Kashiva (1998) und Carmana *et al.* (1998) berücksichtigt. Im Zusammenhang mit dem Gleichungssystem (4.6) belegen die Ergebnisse von Pellerin

4.2. Konvektionsexperimente

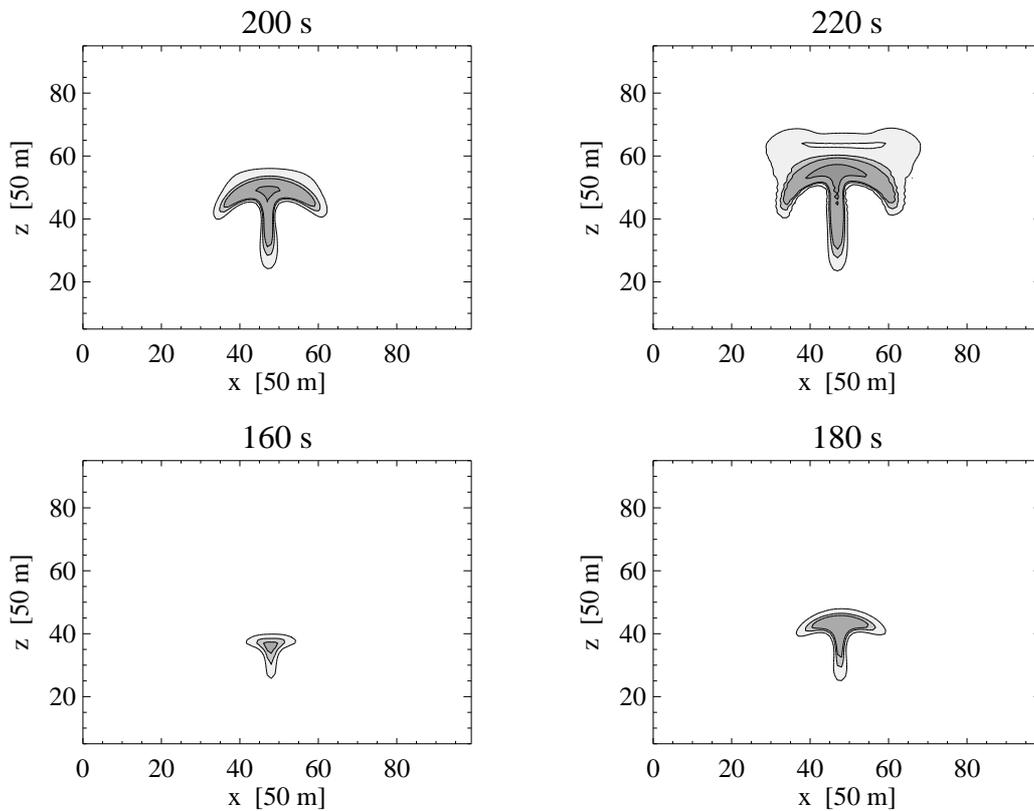


Abbildung 4.13: Dargestellt ist der zu 4.12 gehörende Massenbruch von Wolkenwasser q_c . Die Abbildung zeigt das Wachstum einer warmen Wasserwolke. Den Isolinien wird ein Wolkenwassergehalt von $5 \cdot 10^{-4}$, $8 \cdot 10^{-4}$, 10^{-3} , $2 \cdot 10^{-3}$, $3 \cdot 10^{-3}$ kg in 1 kg Luftmasse zugeordnet.

et al. (1995) und Margolin *et al.* (1997), daß Kompatibilität zwischen der Temperatur und der umgewandelten atmosphärischen Wassermenge in der numerischen Berechnung des feuchtkonvektiven Aufstieges eines idealisierten Cumulus eine wichtige Rolle spielt. Bei den oszillierenden zentrierten Eulerschen Differenzen wäre die Kompatibilität auch mit zusätzlichen Filtern nur schwer zu erfüllen. Deshalb wird die Berechnung des feuchtkonvektiven Aufstiegs nur mit den interpolierenden und nicht-interpolierenden Methoden durchgeführt. Die interpolierende Methode wurde für diesen Zweck monoton und kompatibel gestaltet, indem Überschüsse eliminiert und mittels Korrektur von Pellerin *et al.* (1995) künstliche Kondensation vermieden werden. Das Partikelverfahren ist per Definition monoton und kompatibel.

Der Anfangszustand, sowie die Diskretisierungsansätze und Parameter wurden aus dem adiabatischen Experiment übernommen; das heißt: quasi-hydrostatische Schichtung

4. Anwendungsbeispiele

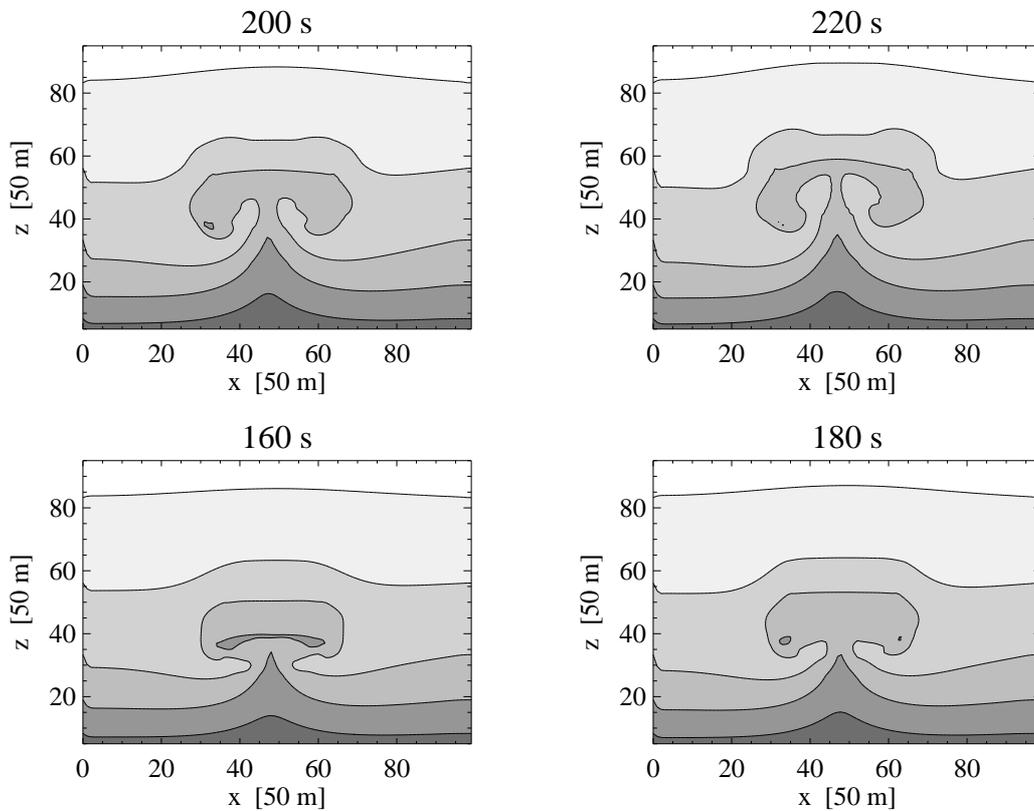


Abbildung 4.14: Dargestellt ist der zu 4.12 gehörende Massenbruch des Wasserdampfs $q_v = M_v / (M_l + M_v)$. Infolge der entstandenen seitlichen Zirkulationen wird aus unteren Schichten Wasserdampf nach oben advehiert. Der Transport findet entlang der sich trichterförmig zusammenziehenden Trajektorien statt. Die Isolinien bedeuten $8 \cdot 10^{-4}$, $2 \cdot 10^{-3}$, $4 \cdot 10^{-3}$, $6 \cdot 10^{-3}$, $8 \cdot 10^{-3}$ kg Wasserdampf in 1 kg Luftmasse.

mit dem Referenzdruck $p_0 = 970$ hPa, konstante Höhenprofile der potentiellen Temperatur mit $\Theta = 290$ K (neutrale Modellatmosphäre) und der relativen Feuchte mit $RH=80\%$. Dann wurde, wie bei dem adiabatischen Experiment, dem Hintergrundfeld der potentiellen Temperatur Θ eine Störung von 5 K überlagert. Entsprechend wurde zunächst ein adiabatischer Aufstieg bis zur Kondensationshöhe angeregt und von dort aus entlang der Feuchtadiabate weitergeführt. Oberhalb der Kondensationshöhe fand im Sinne der wolkenphysikalischen Parametrisierung Wolkenbildung statt.

Die Abb. 4.12 - 4.14 zeigen die Modellrechnungen mit der interpolierenden Methode, und die Abb. 4.15 - 4.17 die entsprechenden Resultate mit dem nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Verfahren. An der Verteilung der potentiellen Temperatur ist

4.2. Konvektionsexperimente

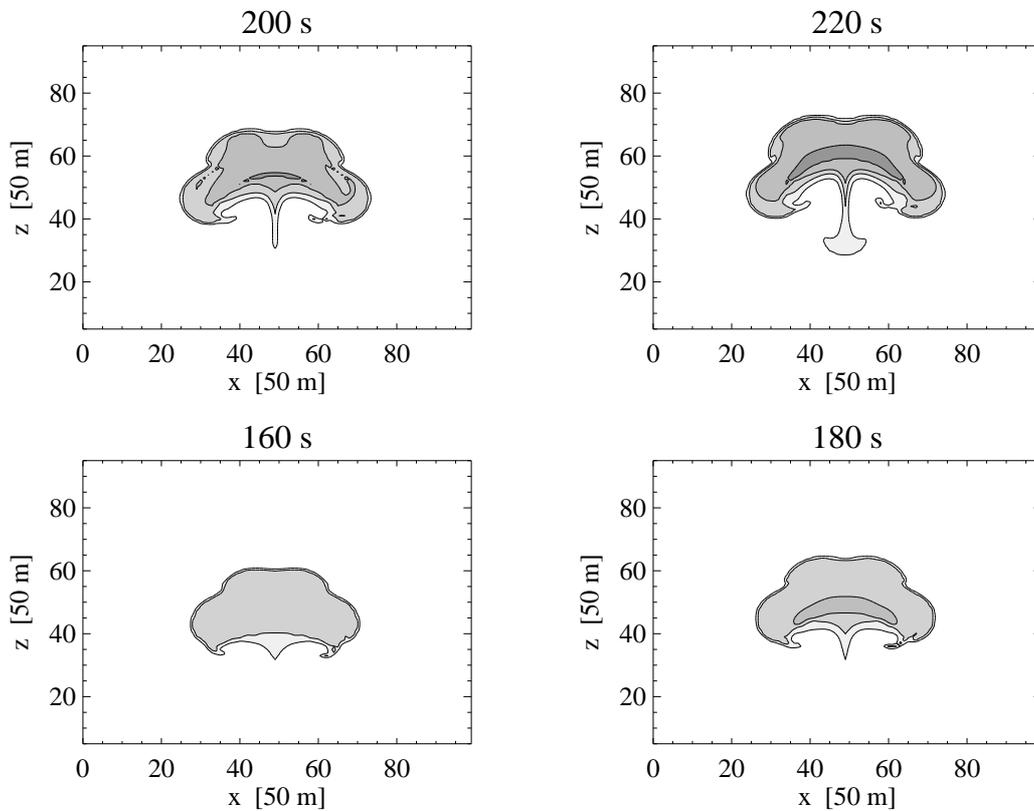


Abbildung 4.15: Die Grafik zeigt die mit dem nicht-interpolierenden Verfahren simulierte Verteilung der potentiellen Temperatur Θ . Der Wertebereich der Linien und der Schattierung korrespondiert mit Abb. 4.12.

sowohl im Falle der interpolierenden als auch der nicht-interpolierenden Methode zu erkennen, daß die äußere Berandung starke Ähnlichkeit mit der Form zeigt, die ohne Phasenumwandlung während des trockenadiabatischen Aufstiegs ($C_d = 0$) zustande kam. Darüber hinaus läßt sich im Inneren der Luftblase eine Erhöhung von potentieller Temperatur an der Stelle beobachten, wo Wasserdampf kondensiert und demzufolge das in Abb. 4.13 bzw. 4.16 dargestellte Wolkenwasser zunimmt. Dies zeigen besonders deutlich die linsenförmigen, sich horizontal erstreckenden Bereiche. Der zu kondensierende Wasserdampf wird entsprechend der Analyse von Grabowski & Clark (1985) aus unteren Schichten durch eine Zirkulation zugeführt. Sie transportiert Luftmasse auf beiden Seiten an der vertikalen Achse von oben nach unten bzw. umgekehrt. Dadurch gelangt entlang des von unten nach oben verlaufenden Bündels von Trajektorien immer mehr Wasserdampf in die Kondensationshöhe. Gleichzeitig entsteht aus dem zur Verfügung stehenden

4. Anwendungsbeispiele

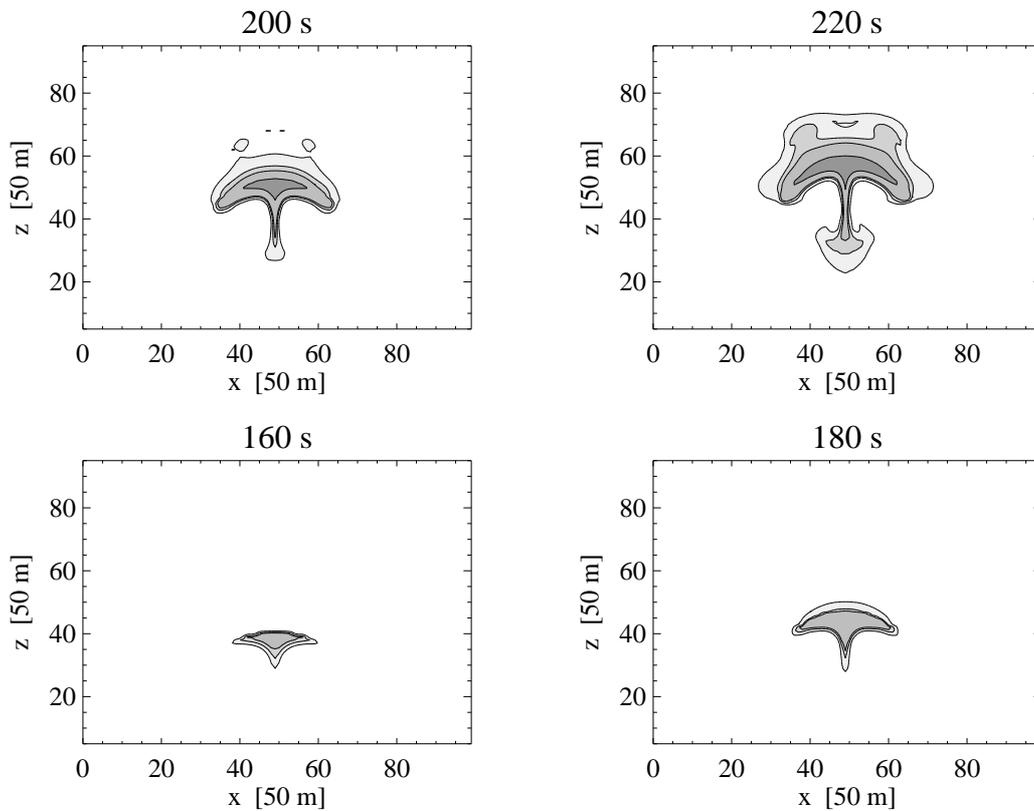


Abbildung 4.16: Die Grafik zeigt die mit dem nicht-interpolierenden Verfahren simulierte Verteilung des Massenbruchs von Wolkenwassergehalt q_c . Die Konturen und die Schattierung wurden gemäß Abb. 4.13 verwendet.

Wasserdampf eine pilzförmige Wasserwolke.

Der Zirkulationsmechanismus kommt durch die unterschiedliche Behandlung der Advektion in den zu vergleichenden Experimenten anders zustande und bewirkt eine unterschiedliche Verteilung der Felder. Im Falle der potentiellen Temperatur nehmen die zwei oberen von der Isolinie $\Theta = 298$ K umrandeten Bereiche in den interpolierend erzielten Resultaten in Abb. 4.12 zu. Beim Partikelverfahren in Abb. 4.15 ist zu beobachten, daß, wie im Falle des trockenen Aufstiegs, die oberen Auswölbungen klein bleiben, während die unteren üppiger werden. Der in der Mitte nach unten zeigende Schlauch wächst in beiden Modellsimulationen ungefähr gleichmäßig an. Verschieden ist dabei jedoch die Veränderung des Schlauchs und die innere Fläche, in der die potentielle Temperatur auf Grund von Kondensation ansteigt. Letzteres spiegelt sich auch im Wachstum der Wolke in Abb. 4.13, 4.16 wieder. Die Isolinien $q_c = 2 \cdot 10^{-3}$, dies sind die hellsten Gebiete, vertei-

4.2. Konvektionsexperimente

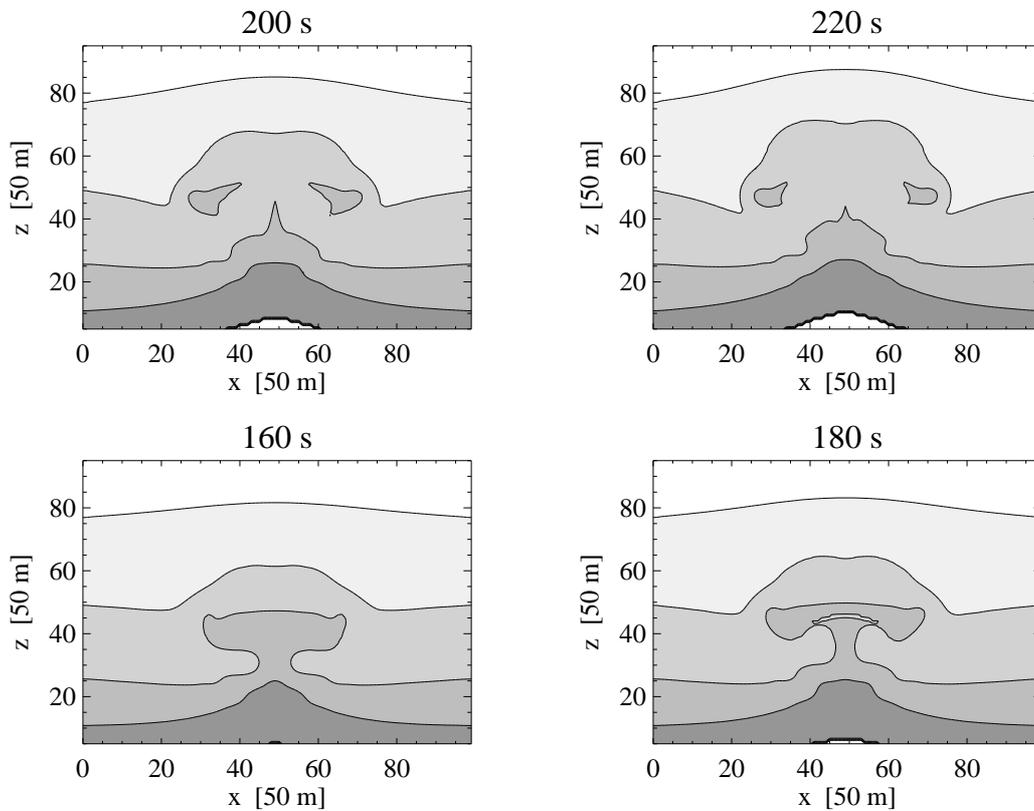


Abbildung 4.17: Die Grafik zeigt die mit dem nicht-interpolierenden Verfahren simulierte Verteilung des Massenbruchs von Wasserdampfgehalt q_v . Die Konturen und die Schattierung entsprechen Abb. 4.14.

len sich bei der interpolierenden Lagrangeschen Lösung vollständig anders. In der oberen Hälfte der nicht-interpolierend berechneten Wolke kapseln sich durch die aufgebaute Zirkulation zum Teil Wolkenzellen ab und bilden separate Strukturen. Das interpolierend berechnete Ergebnis zeigt lediglich eine Ausweitung der Isolinie von $5 \cdot 10^{-4}$ kg Wolkenwasser in 1 kg Luftmasse an der Wolkenoberseite, und einen horizontalen Riß. Ähnlich verschieden entwickelt sich die Verteilung des Wasserdampfes in Abb. 4.14, 4.17. Mit dem Partikelverfahren erhält man eine Austrocknung der Luft in den unteren Schichten, die die anders gewählte untere Randbedingung verursacht. Allerdings ist der Unterschied in der Verteilung des Wasserdampfgehaltes zirkulationsbedingt. Im Gegensatz zur interpolierenden Modellrechnungen, trennen sich als Folge stärkerer Wolkenbildung und Zirkulation anfangs zusammenhängender Bereiche.

4. Anwendungsbeispiele

SCHLUSSBEMERKUNGEN

In dieser Arbeit wurde die Anwendbarkeit der nicht-interpolierenden Partikel-Lagrange-schen Methode zur numerischen Berechnung der Advektion anhand von Modellstudien untersucht. Dabei wurden numerische Lösungen durch herkömmliche Näherungsmethoden gegenüber der nicht-interpolierend berechneten Lösung qualitativ verglichen. Ein solcher Vergleich war deshalb möglich, weil herkömmliche Näherungsverfahren analytisch hinreichend untersucht sind und weil genügend Erfahrung über die Wirkung und Erscheinungsform ihrer Näherungsfehler vorliegt.

Wie man von den Ergebnissen in Abb. 2.13 ablesen kann, kann man Näherungsfehler sowohl als einen der Lösung überlagerten dissipativen (glättenden) Prozess wahrnehmen, als auch als hochfrequente Oszillationen am Verlauf der Lösung beobachten kann. Glättung und Oszillationen haben die Eigenschaft, daß sie bei Erhöhung der räumlichen Auflösung der prognostischen Größen sowie der Näherungsordnung zwar reduziert, aber nicht gänzlich eliminiert werden können. Beide treten dann besonders ausgeprägt auf, wenn die Verteilungen der prognostischen Größen starke räumliche Gradienten enthalten.

Dadurch, daß jede Lösungsmethode einen anderen Näherungsfehler verursacht, kann man die numerischen Verfahren der jeweiligen Aufgabenstellung anpassen, wobei in einigen Anwendungen, insbesondere in der numerischen Wettervorhersage, auch der Aspekt des Rechenaufwandes und somit der Faktor der Rechenzeit eine wesentliche Rolle spielt. Lösungsverfahren, die wegen ihrer hohen Genauigkeit in den Ingenieurwissenschaften zum Einsatz kommen, sind wegen ihrer zeitintensiven Rechenprozedur für die tägliche Routine der numerischen Wettervorhersage nicht geeignet. Deshalb werden in den Modellstudien hauptsächlich solche Näherungsmethoden dem Vergleich mit der nicht-interpolierenden Methode unterworfen, die zur Berechnung der EULERSchen oder NAVIER-STOKESSchen Gleichungen in der numerischen Wettervorhersage angewandt werden. Dies sind zentrierte finite Differenzenverfahren, sowie die interpolierende Lagrangesche Berechnungsweise.

Auf Grund der Tatsache, daß die Näherungsfehler einer Methode nicht von der Komplexität der Aufgabenstellung abhängen, läßt sich die Frage, ob die Genauigkeit einer Methode zur Lösung eines bestimmten Anfangswertproblems hinreichend ist, auch anhand

5. Schlussbemerkungen

einfachster Aufgabenstellungen beantworten. Deshalb werden die Lösungen der Gleichungen (2.5) und (2.13), sowie ihre entsprechenden zweidimensionalen Formulierungen als Testfall für Fluß- bzw. Advektionsmethoden verwendet. Als Beispiel für solche Testergebnisse wurde in Abb. 2.1 die Lösung von (2.13) durch zentrierte finite Differenzen dargestellt, und in der Diskussion dieser Ergebnisse angedeutet, daß Glättung und Oszillationen vor allem an den großen Gradienten entstehen. Im Gegensatz zu herkömmlichen Verfahren wird die gleiche Aufgabe von einem nicht-interpolierenden Lösungsverfahren, wie der Partikel-Lagrangeschen Methode, fehlerfrei gelöst, denn eine solche Lösung kommt nicht durch Näherung der räumlichen Gradienten zustande. Der Beweis dafür wird durch Lösung des Gleichungssystems (3.2) unter den in Kapitel 3 angegebenen Anfangsbedingungen erbracht, da jene Anfangswert-Aufgabe, wie im Falle der Lösung von (2.13), einer konstanten Verlagerung entspricht.

In den weiteren Modellstudien mit dem dichtekonstanten barotropen Modell, sowie in den Ausbreitungs- und Konvektionsberechnungen wurde als einziges negatives Ergebnis gefunden, daß die Überströmung einer orographischen Erhebung im barotropen Modell mit dem nicht-interpolierenden Verfahren zu Ungenauigkeit führt, sobald die Erhebung kleinerskalig wird. Die Ursache dafür liegt darin, daß die Gittertransformationen T^{EL} und T^{LE} , zwecks Erhaltung der Monotonität der nicht-interpolierenden Methode und Beschränkung des Rechenaufwandes, Interpolationen niedriger Ordnung verwenden.

In allen anderen numerischen Experimenten unterstreichen die Ergebnisse die Anwendbarkeit der nicht-interpolierenden Partikel-Lagrangeschen Methode dadurch, daß die numerische Lösung das geforderte Kriterium von Monotonität im Gegensatz zu herkömmlichen Näherungsmethoden erfüllt. Die Verteilung der Schadstoffkonzentration im Falle der Ausbreitungsszenarien sowie der prognostischen Größen des feuchtkonvektiven Aufstiegs im nicht-hydrostatischen Modell bleibt zusammenhängend und kompakt; die Gradienten dieser Größen werden nicht geglättet.

Am deutlichsten ist die Steigerung der Genauigkeit an den Ergebnissen in Abb. 4.11, gegenüber den Abb. 4.9 und 4.10 erkennbar. Der Aufstieg der warmen Luftblase wird mit der Partikel-Methode viel genauer behandelt, als mit zentrierten Differenzen und mit dem interpolierenden Verfahren. Weder Glättung noch dispersive Oszillationen am Temperaturgradienten der Luftblase beeinträchtigen die Θ -Verteilung, sodaß auch solche kleinskaligen Zirkulationsprozesse rechnerisch aufgelöst werden, die in den Abb. 4.9 und 4.10 numerischer Lärm überlagert.

Zusammenfassend läßt sich über die Anwendbarkeit der Partikelmethode feststellen, daß sie in bereits vorhandenen Modellumgebungen mit Hilfe monotoner Transformationsbeziehungen zwischen den Lagrangeschen und Eulerschen Gitterräumen vorteilhaft

einsetzbar ist. Somit ist aus wissenschaftlicher Sicht anzunehmen, daß auch in der operationellen Wettervorhersage solche Verfahren erfolgreich eingesetzt werden können, wenn sie programmtechnisch soweit optimiert sind, daß sie dem verkraftbaren Rechenaufwand in der zur Verfügung stehenden Zeit gerecht werden.

5. Schlussbemerkungen

A

ERGÄNZENDE RECHNUNGEN

Die Grundgleichungen des Eulerschen Ausbreitungsmodells des DWD

Bei der Diskretisierung der Transportgleichung (4.4) handelt es sich um eine Formulierung in Anlehnung an das operationelle Europa Modell des Deutschen Wetterdienstes. Die Form der diskreten Transportgleichung berücksichtigt die auf dem gleichmäßigen Rechengitter aufgelösten numerischen Lösungen über Gitterpunktwerte der Feldfunktionen als Integralmittelwerte, während die subskaligen Prozesse als turbulente Phänomene parametrisiert werden. Die skaligen und subskaligen Lösungsanteile werden durch Mittelbildung getrennt. Für die Größe a lautet das REYNOLDSsche arithmetische Mittel $\bar{a} = a - a'$, das gewichtete HESSELBERGSche Mittel $\hat{a} = a - a''$. Die Bezeichnungen a' bzw. a'' bedeuten die Abweichung vom jeweiligen Mittelwert.

Mit Verwendung der Mittelbildung nach Herbert (1975) und gleichzeitiger Formulierung in Kugelkoordinaten ist (4.3) folgendermaßen darstellbar

$$\begin{aligned}
 & \int_{\tilde{V}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \hat{\psi} \right) r^2 \cos \varphi \, d\lambda d\varphi d\eta && + \\
 & \int_{\tilde{\lambda}} \int_{\tilde{\varphi}} d\lambda \, d\varphi \, r^2 \cos \varphi \left[\hat{\eta} \hat{\psi} + \overline{\eta'} \psi' \right]_{\tilde{\lambda}, \tilde{\varphi}, \tilde{\eta} - d\tilde{\eta}/2}^{\tilde{\lambda}, \tilde{\varphi}, \tilde{\eta} + d\tilde{\eta}/2} && + \\
 & \int_{\tilde{\eta}} \int_{\tilde{\varphi}} d\eta \, d\varphi \, r \left[\frac{\partial p}{\partial \eta} \hat{u} \hat{\psi} + \overline{\frac{\partial p}{\partial \eta} u' \psi'} \right]_{\tilde{\lambda} + d\tilde{\lambda}/2, \tilde{\varphi}, \tilde{\eta}}^{\tilde{\lambda} - d\tilde{\lambda}/2, \tilde{\varphi}, \tilde{\eta}} && + \\
 & \int_{\tilde{\eta}} \int_{\tilde{\lambda}} d\eta \, d\lambda \, r \left[\cos \varphi \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \hat{v} \hat{\psi} + \overline{\frac{\partial p}{\partial \eta} v' \psi'} \right) \right]_{\tilde{\lambda}, \tilde{\varphi} + d\tilde{\varphi}/2, \tilde{\eta}}^{\tilde{\lambda}, \tilde{\varphi} - d\tilde{\varphi}/2, \tilde{\eta}} && = \\
 & \int_{\tilde{V}} p_{\psi} \, d\lambda d\varphi d\eta, && \quad (A.1)
 \end{aligned}$$

wobei $\hat{\eta} = \frac{\partial p}{\partial \eta} \hat{\eta}$, und $[\dots]_a^b$ bezeichnet den Differenzwert der Klammergröße an den Punkten b und a .

A. Ergänzende Rechnungen

Nach Ausführung der Integration und unter Weglassung des Mittelungssymbols für das HESSELBERG'sche Mittel resultiert die im Raum diskretisierte Transportgleichung für das Volumenelement $V_{i,j,k} = d\lambda d\varphi d\eta$, dessen Mittelpunkt am Punkt $(i \cdot d\lambda, j \cdot d\varphi, k \cdot d\eta)$ liegt, in folgender Flußform

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\Delta p \psi)_{i,j,k} && + \\
& \left[\overset{*}{\eta} \psi + \overline{\overset{*}{\eta} \psi'} \right]_{i,j,k-1/2}^{i,j,k+1/2} && + \\
& \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \lambda} \left[\Delta p u \psi + \overline{\Delta p u' \psi'} \right]_{i-1/2,j,k}^{i+1/2,j,k} && + \\
& \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \varphi} \left[\cos \varphi \left(\Delta p v \psi + \overline{\Delta p v' \psi'} \right) \right]_{i,j-1/2,k}^{i,j+1/2,k} && = \\
& p_\psi && \quad \quad \quad (A.2)
\end{aligned}$$

Da die Lösungsprozedur der Transportgleichung (4.3) sowohl die advective als auch die Flußform der Gleichung verwendet, benötigt man die Kontinuitätsgleichung, um die advective Formulierung herzuleiten. Die Kontinuitätsgleichung erhält man gemäß der Rechenschritte (2.2)-(2.5), wobei an der Kontinuitätsgleichung zwecks Herleitung der Transportgleichung keine Mittelung durchgeführt wird. Die diskretisierte Kontinuitätsgleichung lautet somit

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\Delta p)_{i,j,k} + \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \lambda} \left\{ (u \Delta p)_{i+1/2,j,k} - (u \Delta p)_{i-1/2,j,k} \right\} \\
& + \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \varphi} \left\{ (v \cos \varphi \Delta p)_{i,j+1/2,k} - (v \cos \varphi \Delta p)_{i,j-1/2,k} \right\} \\
& \quad \quad \quad + \overset{*}{\eta}_{i,j,k+1/2} - \overset{*}{\eta}_{i,j,k-1/2} = 0. \quad (A.3)
\end{aligned}$$

Nach Trennung der skaligen und turbulenten Anteile läßt sich für die Transportgleichung in Flußform schreiben

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\Delta p \psi)_{i,j,k} + A_H + A_V + D_H + D_V = p_\psi \\
& A_V = (\overset{*}{\eta} \psi)_{i,j,k+1/2} - (\overset{*}{\eta} \psi)_{i,j,k-1/2} \\
& A_H = \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \lambda} \left\{ (\Delta p u \psi)_{i+1/2,j,k} - (\Delta p u \psi)_{i-1/2,j,k} \right\} \\
& \quad \quad \quad + \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \varphi} \left\{ (\Delta p \cos \varphi v \psi)_{i,j+1/2,k} - (\Delta p \cos \varphi v \psi)_{i,j-1/2,k} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_V &= \overline{(\eta' \psi')}_{i,j,k+1/2} - \overline{(\eta' \psi')}_{i,j,k-1/2} \\
D_H &= \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \lambda} \left\{ \overline{(\Delta p u' \psi')}_{i+1/2,j,k} - \overline{(\Delta p u' \psi')}_{i-1/2,j,k} \right\} \\
&\quad + \frac{1}{a \cos \varphi_j \Delta \lambda} \left\{ \overline{(\Delta p \cos \varphi v' \psi')}_{i,j+1/2,k} - \right. \\
&\quad \left. \overline{(\Delta p \cos \varphi v' \psi')}_{i,j-1/2,k} \right\}. \tag{A.4}
\end{aligned}$$

Für die Advektionsform ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Delta p_{i,j,k} \frac{\partial \psi_{i,j,k}}{\partial t} + a_H + a_V + d_H + d_V &= p_\psi \\
a_V &= \eta'_{i,j,k+1/2} \frac{1}{2} (\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}) + \eta'_{i,j,k-1/2} \frac{1}{2} (\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}) \\
a_H &= \frac{1}{2 a \cos \varphi_j \Delta \lambda} \left\{ (\Delta p u)_{i+1/2,j,k} (\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}) + \right. \\
&\quad \left. (\Delta p u)_{i-1/2,j,k} (\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2 a \cos \varphi_j \Delta \varphi} \left\{ (\Delta p v \cos \varphi)_{i,j+1/2,k} (\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}) + \right. \\
&\quad \left. (\Delta p v \cos \varphi)_{i,j-1/2,k} (\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}) \right\}. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Die Lösungsmethode der Transportgleichung verwendet die Flußform (A.4) zur Berechnung der skaligen Prozesse und die advektive Formulierung (A.5) zur Berechnung der subskaligen, turbulenten Phänomene. Für die Terme d_H und d_V werden folgende Diffusionsansätze gemacht:

- Vertikaldiffusion

$$\overline{\eta' \psi'} = g \eta^{T_\psi} \text{ mit } \eta^{T_\psi} = -g \varrho^2 K_{vert} \frac{\partial \psi}{\partial p} \tag{A.6}$$

- Horizontaldiffusion

entsprechend der Definition des HESSELBERG'schen Mittels gilt

$$\begin{aligned}
\overline{\Delta p u' \psi'} &= \overline{\Delta p} \widehat{u' \psi'}, & \overline{\Delta p v' \psi'} &= \overline{\Delta p} \widehat{v' \psi'} \\
\text{und damit} & & \widehat{\mathbf{v}' \psi'} &= -K_{hor} \nabla \psi. \tag{A.7}
\end{aligned}$$

A. Ergänzende Rechnungen

Mit (A.6) und (A.7) lassen sich dann die turbulenten Terme in diskreter Advektionsform schreiben als

$$\begin{aligned}
 d_V &= g(\eta_{i,j,k+1/2}^{T_\psi} - \eta_{i,j,k-1/2}^{T_\psi}) \\
 d_H &= \frac{1}{\Delta p a \cos \varphi_j^2 \Delta \lambda^2} \left\{ (\Delta p K_{hor})_{i+1/2,j,k} (\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}) - \right. \\
 &\quad \left. (\Delta p K_{hor})_{i-1/2,j,k} (\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}) \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{a \cos \varphi_j^2 \Delta \varphi^2} \left\{ (\cos \varphi \Delta p K_{hor})_{i,j+1/2,k} (\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}) - \right. \\
 &\quad \left. (\cos \varphi \Delta p K_{hor})_{i,j-1/2,k} (\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}) \right\}. \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

- Arakawa, A., & Lamb, V.R. 1981. A potential enstrophy and energy conserving scheme for the shallow water equations. *Mon. Wea. Rev.*, **109**, 18–36.
- Bartello, P., & Thomas, S.J. 1996. The cost-effectiveness of semi-Lagrangian advection. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2883–2897.
- Bates, J.R., & McDonald, A. 1982. Multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes: analysis and application to a multi-level primitive equation model. *Mon. Wea. Rev.*, **110**, 1831–1842.
- Bates, J.R., Semazzi, H.M., Higgins, R.W., & Barros, S.R.M. 1990. Integration of the shallow water equations on the sphere using a vector semi-Lagrangian scheme with a multigrid solver. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 1615–1627.
- Baumgardner, J.R., & Frederickson, P.O. 1985. Icosahedral discretisation of the two-sphere. *SIAM J. Num. Anal.*, **22**, 1107–1115.
- Bonaventura, L. 2000. A numerical scheme using the height coordinate for a nonhydrostatic and fully elastic model of atmospheric flows. *J. Comp. Phys.* in Druck.
- Boris, J. 1986. A vectorized 'Near Neighbors' algorithm of order N using a monotonic logical grid. *J. Comp. Phys.*, **66**, 1–20.
- Boris, J.P., & Book, D.L. 1973. Flux corrected transport. I: SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *J. Comp. Phys.*, **11**, 38–52.
- Bott, A. 1989. A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of advective fluxes. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1006–1015.
- Bott, A. 1992. Monotone flux limitation in the area-preserving flux-form advection algorithm. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 2592–2602.
- Böttcher, M. 1996. A semi-Lagrangian advection scheme with modified exponential splines. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 716–729.

LITERATURVERZEICHNIS

- Browning, G.L., & Kreiss, H.-O. 1994. Splitting methods for problems with different timescales. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 2614–2622.
- Carmana, E.J., Burton, D.E., Shashakov, M.J., & Whalen, P.P. 1998. The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy. *J. Comp. Phys.*, **146**, 227–262.
- Carpenter, R.L., Droegemeier, K.K., Woodward, P., & Hane, C.E. 1990. Application of the piecewise parabolic method (PPM) to meteorological modeling. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 586–612.
- Chock, D.P. 1991. A comparison of numerical methods for solving the advection equation-III. *Atmos. Env.*, **25A**, 853–871.
- Colella, P., & Woodward, P. 1984. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *J. Comp. Phys.*, **54**, 174–201.
- Côté, J., Gravel, S., & Staniforth, A. 1995. A generalized family of schemes that eliminate the spurious resonant response of semi-Lagrangian schemes to orographic forcing. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 3605–3613.
- Crowley, W.P. 1968. Numerical advection experiments. *Mon. Wea. Rev.*, **96**, 1–12.
- Doms, G., & Herbert, F. 1985. *Fluid- und Mikrodynamik in numerischen Modellen konvektiver Wolken*. Berichte des Institutes für Meteorologie und Geophysik Nummer 62. Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt am Main. 378 Seiten.
- Doswell, C.A. 1984. A kinematic analysis of frontogenesis associated with a nondivergent vortex. *J. Atmos. Sci.*, **41**, 1242–1248.
- Easter, R.C. 1993. Two modified versions of Bott's positive definite advection scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 297–304.
- Edelmann, W. 1972. An analytical solution for stationary barotropic flow crossing a meridional mountain. *Beitr. Phys. Atmos.*, **45**, 87–93.
- Eliassen, E., Machenhauer, B., & Rasmussen, E. 1970. *On a numerical method for integration of the hydrodynamical equations with a spectral representation of the horizontal fields*. Report 2. Institut for Teoretisk Meteorologi. 35 Seiten.
- Fogelson, A. 1992. Particle-method solution of two-dimensional convection-diffusion equations. *J. Comp. Phys.*, **100**, 1–16.

LITERATURVERZEICHNIS

- Gadd, A.J. 1978. Split-explicit integration scheme for numerical weather prediction. *Q.J.R. Met. Soc.*, **104**, 569–582.
- Giraldo, F.X. 1997. Lagrange-Galerkin methods on spherical geodesic grids. *J. Comp. Phys.*, **136**, 197–213.
- Grabowski, W.W., & Clark, T.L. 1985. Cloud-environment interface stability: rising thermal calculations in two spatial dimensions. *J. Atmos. Sci.*, **48**, 527–546.
- Grabowski, W.W., & Smolarkiewicz, P.K. 1990. Monotone finite-difference approximation to the advection-condensation problem. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 2082–2097.
- Grabowski, W.W., & Smolarkiewicz, P.K. 1996. Two-time-level semi-Lagrangian modeling of precipitating clouds. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 487–497.
- Haltiner, G.J., & Williams, R.T. 1980. *Numerical Prediction and Dynamic Meteorology*. John Wiley & Sons, New York. 477 Seiten.
- Harten, A. 1983. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comp. Phys.*, **49**, 357–393.
- Hasselbeck, T. 1996. *Das konturdynamische Verfahren in der atmosphärischen Wirbeldynamik*. Diplomarbeit. Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt am Main. 46 Seiten.
- Herbert, F. 1975. Irreversible Prozesse in der Atmosphäre; Teil 3. *Beitr. Phys. Atmos.*, **48**, 1–29.
- Herbert, F. 1980. Die Erschliessung der numerischen Wetterprognose durch die Hypothese der Lärmfreien Atmosphäre. *Pure and Appl. Geoph.*, **118**(4), 880–912.
- Héreil, P., & Laprise, R. 1996. Sensitivity of internal gravity waves solution to the time step of a semi-implicit semi-Lagrangian nonhydrostatic model. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 972–999.
- Hockney, R.W., & Eastwood, J.W. 1981. *Computer simulations using particles*. Adam Hilger, Bristol. 540 Seiten.
- Hólm, E.V. 1995. A fully two-dimensional, nonoscillatory advection scheme for momentum and scalar transport. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 536–552.

LITERATURVERZEICHNIS

- Klemp, J.B., & Wilhelmson, R.B. 1978. The simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 1070–1096.
- Laprise, J.P.R., & Plante, A. 1995. A class of semi-Lagrangian mass-integrated (SLIM) numerical transport algorithm. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 553–565.
- Leonhard, B.P., Lock, A.P., & M.K.MacVean. 1996. Conservative explicit unrestricted-time-step multidimensional constancy-preserving advection schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2588–2606.
- Leslie, L.M., & Purser, R.J. 1995. Three-dimensional mass-conserving semi-Lagrangian scheme employing forward trajectories. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 2551–2566.
- LeVeque, R.J. 1992. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser. 224 Seiten.
- Lin, S., Chao, W.C., Sud, Y.C., & Walker, G.K. 1994. A class of van Leer-type transport schemes and its application to the moisture transport in a general circulation model. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 1575–1593.
- Lin, S-J., & Rood, R.B. 1996. Multidimensional flux-form semi-Lagrangian transport scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2046–2070.
- Lin, S-J., & Rood, R.B. 1997. An explicit flux-form semi-Lagrangian shallow-water model on the sphere. *Q. J. R. Met. Soc.*, **123**, 2477–2498.
- Machenhauer, B., & Olk, M. 1995. *The implementation of the semi-implicit scheme in cell-integrated semi-Lagrangian models*. Report 156. Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg. 32 Seiten.
- Margolin, L., Reisner, J., & Smolarkiewicz, P.K. 1997. Application of the volume-of-fluid method to the advection-condensation problem. *Mon. Wea. Rev.*, **125**, 2265–2273.
- McDonald, A. 1984. Accuracy of multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **112**, 1267–1275.
- McDonald, A. 1986. A semi-Lagrangian and semi-implicit two-time level integration scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 824–830.
- McDonald, A. 1987. Accuracy of multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes II. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 1446–1450.

LITERATURVERZEICHNIS

- McDonald, A. 1998. The origin of noise in semi-Lagrangian methods. *In: Recent developments in numerical methods for atmospheric modeling*. Seminar Proceedings. ECMWF. Seiten 308-304.
- McDonald, A., & J.R.Bates. 1987. Improving the estimate of the departure point position in a two-time level semi-Lagrangian and semi-implicit scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 737–739.
- Monaghan, J.J. 1982. Shock simulation by the particle method SPH. *J. Comp. Phys.*, **52**, 374–389.
- Monaghan, J.J. 1985. Particle methods for hydrodynamics. *Phys. Repts.*, **3**, 71–124.
- Monaghan, J.J. 1988. An introduction to SPH. *Comp. Phys. Comm.*, **48**, 89–96.
- Monaghan, J.J. 1992. Smoothed particle hydrodynamics. *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **30**, 543–74.
- Monaghan, J.J., & Gingold, R.A. 1983. Shock simulation by the particle method SPH. *J. Comp. Phys.*, **52**(2), 374–389.
- Müller, R. 1992. The performance of classical versus modern finite volume advection schemes for atmospheric modeling in a one-dimensional test-bed. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 1407–1415.
- Nair, R., Côté, J., & Staniforth, A. 1999. Monotonic cascade interpolation for semi-Lagrangian advection. *Q. J. R. Met. Soc.*, **125**, 197–212.
- Olim, M. 1994. A trully non-interpolating semi-Lagrangian Lax-Wendroff scheme. *J. Comp. Phys.*, **112**, 253–266.
- O’Rourke, P.J., Brackbill, J.U., & Larrouturou, B. 1993. On particle-grid interpolation and calculating chemistry in particle-in-cell methods. *J. Comp. Phys.*, **109**, 37–52.
- Orszag, S.A. 1970. Transform method for the calculations of vector-coupled sums: application to the spectral form of the vorticity equation. *J. Atmos. Sci.*, **27**, 890–895.
- Pellerin, P., Laprise, R., & Zawadzki, I. 1995. The performance of a semi-Lagrangian transport scheme for the advection-condensation problem. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 3318–3330.

LITERATURVERZEICHNIS

- Platzman, G.W. 1954. The computational stability of boundary conditions in numerical integration of the barotropic vorticity equation. *Arch. Meteor. Geophys. u. Biokl., Ser.*, **A7**, 29–40.
- Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., & Flanery, B.P. 1992. *Numerical Recipes: the art of scientific computing*. Cambridge University Press. 576 Seiten.
- Purser, R.J. 1998. Non-standard grids. *In: Recent developments in numerical methods for atmospheric modeling*. Seminar Proceedings. ECMWF. Seiten 73-94.
- Purser, R.J., & Leslie, L.M. 1991a. An efficient interpolation procedure for high-order three-dimensional semi-Lagrangian models. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 2492–2498.
- Purser, R.J., & Leslie, L.M. 1991b. Reducing the error in a time-split finite-difference scheme using an incremental technique. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 578– 585.
- Purser, R.J., & Leslie, L.M. 1994. An efficient semi-Lagrangian scheme using third-order semi-implicit time integration and forward trajectories. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 745–756.
- Rancic, M. 1994. An efficient, conservative, monotonic remapping for semi-Lagrangian transport algorithm. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 1213–1217.
- Rivest, C., Staniforth, A., & Robert, A. 1994. Spurious resonant response of semi-Lagrangian discretization to orographic forcing: diagnosis and solution. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 366–376.
- Robert, A. 1981. A stable numerical integration scheme for the primitiv meteorological equations. *Atmos. Ocean.*, **19**, 35–46.
- Robert, A. 1982. A semi-Lagrangian and semi-implicit numerical integration scheme for the primitiv meteorological equations. *Japan Meteor. Soc.*, **60**, 319–325.
- Robert, A. 1993. Bubble convection experiments with a semi-implicit formulation of the Euler equations. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 1865–1873.
- Sadourney, R., Arakawa, A., & Mintz, Y. 1968. Integration of the nondivergent barotropic vorticity equation with an icosahedral-hexagonal grid for the sphere. *Mon. Wea. Rev.*, **96**, 351–356.
- Schepetkin, A.F., & McWilliams, J.C. 1998. Quasy monotone advection scheme based on explicitly locally adaptive dissipation. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 1541–1580.

LITERATURVERZEICHNIS

- Schär, C., & Smolarkiewicz, P.K. 1996. A synchronous and iterative flux-correction formalism for coupled transport equations. *J. Comp. Phys.*, **128**, 101–120.
- Schrodin, R. 1995. *Dokumentation des EM/DM-Systems*. Deutscher Wetterdienst.
- Seibert, P., & Morariu, B. 1991. Improvements of upstream, semi-Lagrangian numerical advection schemes. *J. Appl. Met.*, **30**, 117–125.
- Silberman, I.S. 1954. Planetary waves in the atmosphere. *J. Meteor.*, **11**, 27–34.
- Skamarock, W.C., & Klemp, J.B. 1992. Stability of time-split numerical methods for the hydrostatic and nonhydrostatic elastic equations. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 2209–2127.
- Skamarock, W.C., & Klemp, J.B. 1994. Efficiency and accuracy of the Klemp-Wilhelmson time-splitting. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 2623–2630.
- Skamarock, W.C., Smolarkiewicz, P.K., & Klemp, J.B. 1997. Preconditioned conjugate-residual solvers for Helmholtz equations in nonhydrostatic models. *Mon. Wea. Rev.*, **125**, 587–599.
- Smolarkiewicz, P.K. 1983. A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 479–487.
- Smolarkiewicz, P.K., Grubsic, V., & Margolin, L.G. 1997. On forward-in-time differencing for fluids: stopping criteria for iterative solutions of anelastic pressure equations. *Mon. Wea. Rev.*, **125**, 647–654.
- Staniforth, A., & Côté, J. 1991. Semi-Lagrangian schemes for atmospheric models - A review. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 2206–2223.
- Staniforth, A., & Côté, J. 1998. Semi-Lagrangian methods. *In: Recent developments in numerical methods for atmospheric modeling*. Seminar Proceedings. ECMWF. Seiten 95-111.
- Steppeler, J. 1987. *Galerkin and finite element methods in numerical weather prediction*. Bonner meteorologische Abhandlungen 34. Universität Bonn.
- Steppeler, J. 1990a. The concept of the particle Lagrange methods. *Met. Rundsch.*, **43**, 23–31.
- Steppeler, J. 1990b. Simple test calculations concerning finite element applications to numerical weather prediction. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **11**, 209–226.

LITERATURVERZEICHNIS

- Steppeler, J., & Orsz ag, G. 1995. A noninterpolating semi-Lagrangian method based on transformations to an Eulerian grid. *Beitr. Phys. Atmos.*, **68**, 263–270.
- Steppeler, J., & Prohl, P. 1996. Applications of finite volume methods to atmospheric models. *Beitr. Phys. Atmos.*, **69**, 297–306.
- Sun, W.-Y., & Yeh, K.-S. 1997. A general semi-Lagrangian advection scheme employing forward trajectories. *Q. J. R. Met. Soc.*, **123**, 2463–2476.
- Sun, W.-Y., Yeh, K.-S., & Sun, R.-Y. 1996. A simple semi-Lagrangian scheme for advection equations. *Q. J. R. Met. Soc.*, **122**, 1211–1226.
- Sweby, P.K. 1985. *High resolution TVD schemes using flux limiters*. Lectures in Applied Mathematics. Vieweg. Seiten 289-303.
- Temperton, C. 1988. Implicit normal mode initialization. *Mon. Wea. Rev.*, **116**, 1013–1030.
- Temperton, C., & Staniforth, A. 1987. An efficient two-time-level semi-Lagrangian semi-implicit integration scheme. *Q. J. R. Met. Soc.*, **113**, 1025–1039.
- Tremback, C.J., Powell, J., Cotton, W.R., & Pielke, R.A. 1987. The forward-in-time upstream advection scheme: extension to higher orders. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 540–555.
- van Leer, B. 1979. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov’s method. *J. Comp. Phys.*, **32**, 101–106.
- van Leer, B. 1985. *Upwind-difference methods for aerodynamic problems governed by the Euler equations*. Lectures in Applied Mathematics. Vieweg. Seiten 117-138.
- VanderHeyden, W.B., & Kashiva, B. A. 1998. Compatible fluxes for van Leer advection. *J. Comp. Phys.*, **146**, 1–28.
- von der Emde, K. 1992. Solving conservation laws with parabolic and cubic splines. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 482–492.
- Wicker, L.J., & Skamarock, W.C. 1998. A time-splitting scheme for the elastic equations incorporating second order Runge-Kutta time differencing. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 1992–1999.

LITERATURVERZEICHNIS

- Wiin-Nielsen, A. 1959. On the application of trajectory methods in numerical forecasting. *Tellus*, **11**, 180–196.
- Williamson, D.L., & Rasch, P.J. 1989. Two-dimensional semi-Lagrangian transport with shape-preserving interpolation. *Mon. Wea. Rev.*, **107**, 102–129.
- Wippermann, F. 1981. The applicability of several approximations in meso-scale modeling - A linear approach. *Beitr. Phys. Atmos.*, **54**, 298–308.
- Zalesak, S.T. 1979. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithm for fluids. *J. Comp. Phys.*, **31**, 335–362.

Danksagung

In erster Linie möchte ich für die Anregung, Betreuung und Unterstützung dieser Arbeit Herrn Prof. Dr. Fritz Herbert und Herrn Dr. Jürgen Steppeler danken.

Frau Dr. Ulrike Wacker und Herr Dipl.-Met. Achim Picht haben während der Promotionszeit das Manuskript durchgesehen und auf neue Aspekte hingewiesen.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Dezső Dévényi für seine Unterstützung und für die zahlreichen Diskussionen sowie Herrn Dipl.-Met. Thomas Hasselbeck für die Durchsicht der Arbeit und seine wertvollen Anmerkungen.

LEBENS LAUF

Gábor Ország

geboren am 25. März 1967 in Székesfehérvár, Ungarn

wohnhaft in Neugasse 2, 63075 Offenbach

SCHULAU SBILDUNG

1973 - 1985 Grundschule, Gymnasium und Abitur in Székesfehérvár, Ungarn

STUDIUM

1986 - 1991 Studium des Faches Meteorologie an der Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest, Ungarn; Gesamtnote „gut“
(Abschlußprüfung: „sehr gut“ Diplomarbeit: „sehr gut“, Gesamtnote der mit Rigorosum zu prüfenden Fächer: „gut“)

1990 - 1991 zweiter Studiengang an derselben Universität in Informatik, wegen des anschließenden Aufenthaltes in Deutschland ohne Abschluß

ANSTELLUNGEN

1991 - 1992 Forschungsstipendium der Friedrich-Ebert-Stiftung beim Deutschen Wetterdienst unter der Leitung von Dr. Werner Wergen

1992 - 1993 Forschungsstipendium des Deutschen Akademischen Austauschdienstes beim Deutschen Wetterdienst unter der Leitung von Dr. Werner Wergen

1994 - 1995 Projektstelle der Deutschen Forschungsgemeinschaft beim Deutschen Wetterdienst unter der Leitung von Dr. Jürgen Steppeler; Beginn der Promotion

1995 - 2000 Doktorand und wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Prof. Dr. Fritz Herbert in der Arbeitsgruppe Theoretische Meteorologie im Institut für Meteorologie und Geophysik an der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität in Frankfurt am Main