

Ein semi-implizites pseudo-inkompressibles
Finite-Volumen-Modell zur Simulation diabatischer
Atmosphärenprozesse

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

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

von
Fabienne Schmid
aus Hanau

Frankfurt 2021

D 30

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

Dekan: Prof. Dr. Jürgen Runge

Gutachter: Prof. Dr. Ulrich Achatz
Institut für Atmosphäre und Umwelt
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

Prof. Dr. Rupert Klein
Institut für Mathematik
Freie Universität Berlin

Datum der Disputation: 27.04.2022

Zusammenfassung

Atmosphärische Schwerewellen spielen eine wichtige Rolle für die Zirkulation der mittleren Atmosphäre, die wiederum die Troposphäre auf saisonalen und längeren Zeitskalen beeinflusst, und stellen somit ein Schlüsselement für das Wetter- und Klimageschehen dar. Eine adäquate Beschreibung des Lebenszyklus atmosphärischer Schwerewellen in den operationellen Modellen zur Wettervorhersage und Klimasimulation ist daher sehr wünschenswert. Um zu einer verbesserten mathematischen Darstellung der Schwerewellendynamik in den Modellen beizutragen, wurden in den vergangenen Jahren zahlreiche numerische Studien durchgeführt. Wenngleich auch viele der ablaufenden Prozesse gegenwärtig gut verstanden sind, stellt die Wechselwirkung zwischen den mesoskaligen Schwerewellen und den synoptischskaligen Prozessen aufgrund der hohen Komplexität der Strömung weiterhin eine besondere Herausforderung für die Erforschung der Schwerewellenaktivität dar und erfordert oftmals hochaufgelöste numerische Simulationen über große Modelldomänen. Folglich ist es wichtig, dass die angewendeten numerischen Verfahren effizient sind und möglichst idealisierte, aber dennoch atmosphärenähnliche Szenarien simulieren.

In dieser Arbeit wird ein effizientes numerisches Verfahren zur Modellierung der Dynamik interner Schwerewellen sowie deren Einfluss auf die Zirkulation der mittleren Atmosphäre entwickelt. Dabei wird die Diskretisierung des pseudo-inkompressiblen Finite-Volumen-Modells auf einem versetzten Gitter von Rieper et al. (2013), welches der Einfachheit halber Schallwellen aus der Dynamik herausfiltert und zur Untersuchung adiabatischer Atmosphärenprozesse auf der f -Ebene entwickelt wurde, im wesentlichen durch zwei Komponenten erweitert: 1) die Anwendung eines semi-impliziten Zeitschrittverfahrens auf die Bewegungsgleichungen zur Integration der Auftriebs- und Corioliseffekte und 2) die Berücksichtigung einer Heizung durch einen thermischen Relaxationsansatz, welcher in der Troposphäre ein baroklin instabiles Strömungsprofil erzeugt und eine zeitabhängige Dynamik des Hintergrundzustands zulässt.

Zur Überprüfung der korrekten Implementierung der Erweiterungen werden eine Reihe von atmosphärischen Standardteststudien durchgeführt, welche die Konvergenzeigenschaften sowie die Effizienz des Verfahrens validieren. Darüber hinaus zeigen die Testfälle, dass die Ergebnisse des Modells mit anderen veröffentlichten Arbeiten sehr gut übereinstimmen. Schließlich wird als Anwendungstestfall eine mesoskalige Simulation barokliner Instabilität in der Troposphäre durchgeführt, welche ferner die darin enthaltene kleinskalige Wellenaktivität sowie deren Einfluss auf die mittlere Atmosphäre modelliert. Die abschließende Betrachtung der zonal und zeitlich gemittelten Felder zeigt die erwartete Zonalwindumkehr in der Höhe.

Haftungsausschluss

Die Dissertation basiert in weiten Teilen auf Schmid et al. (2021). Insbesondere wurden einige Bilder, Tabellen sowie Formeln direkt aus Schmid et al. (2021) entnommen. Außerdem sind einzelne Textstellen aus der englischen Sprache sinngemäß Schmid et al. (2021) entnommen. Um die Lesbarkeit der vorliegenden Dissertation zu erleichtern, ist dabei nicht jedes Zitat aus Schmid et al. (2021) getrennt hervorgehoben und das Urheberrecht wird lediglich in diesem Haftungsausschluss angegeben.

*In stillem Gedenken
an meine wunderbare Mutter (*1962 – †2020)
und den besten Opa (*1925 – †2020).*

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Stand der Wissenschaft	4
1.3	Ziel der Arbeit	6
1.4	Aufbau der Arbeit	8
2	Das Modell	9
2.1	Die kompressiblen Gleichungen	9
2.2	Die pseudo-inkompressible Näherung	11
2.3	Die zeitliche Entwicklung der Hintergrundatmosphäre	13
2.4	Das numerische Modell	16
2.4.1	Die Grundgleichungen des Modells	17
2.4.2	Grenzschicht und Schwammschicht	18
2.4.3	Zeitunabhängiger Gleichgewichtszustand	19
2.4.4	Heizung, Randbedingungen und Parameterwerte	21
2.4.5	Zeitintegrationsschema	23
2.4.6	Räumliche numerische Diskretisierung	35
2.4.7	Zusammenfassung des numerischen Algorithmus	40
3	Die Modellvalidierung	41
3.1	Adiabatische Testfälle	42
3.1.1	Glatter Wirbel	42
3.1.2	Ruhende Atmosphäre	54
3.1.3	Trägheitsschwerewellen	56
3.2	Diabatische Testfälle	60
3.2.1	Kalte Blase	60
3.2.2	Heizschicht	65
3.2.3	Lokale Heizblase	66
3.2.4	Heizschicht mit lokaler Heizblase	68

4	Anwendungstestfall: Idealisierte barokline Lebenszyklen	73
4.1	Stationarität des Gleichgewichtszustandes	74
4.1.1	Modellkonfiguration	74
4.1.2	Ergebnisse	75
4.2	Idealisierte barokline Lebenszyklen	77
4.2.1	Modellkonfiguration	77
4.2.2	Ergebnisse	78
5	Zusammenfassung und Fazit	91
A	Strategie zur Gewährleistung grundlegender Gleichgewichte	97
B	Drucklöser	99
C	Shapiro Filter	101
D	Brechendes Schwerewellenpaket	103
D.1	Wellenmoden in einer Atmosphäre mit variabler Dichte	106
E	Idealisierte barokline Lebenszyklen mit Limiterfunktion	111
	Literaturverzeichnis	111
	Danksagungen	125
	Lebenslauf	127

Abbildungsverzeichnis

2.1	Meridionaler Verlauf der Relaxationszeit am Boden und die meridionale Modifikation von $\Delta\theta_y$	19
2.2	Eine Gitterzelle von <i>PincFlow</i> inklusive Anordnung der Felder	36
3.1	Dichte- und horizontale Geschwindigkeitsfelder für den Testfall eines glatten Wirbels für <i>PincFlow mit SI</i> inklusive Limiterfunktion	45
3.2	Dichte- und horizontale Geschwindigkeitsfelder für den Testfall eines glatten Wirbels für <i>PincFlow mit SI</i> ohne Limiterfunktion	46
3.3	Relative L_2 und L_∞ Fehler von ρ , u und v für den Testfall eines glatten Wirbels in Bezug auf die Anfangsbedingungen für <i>PincFlow mit SI</i>	49
3.4	Relative L_2 und L_∞ Fehler von ρ , u und v für den Testfall eines glatten Wirbels in Bezug auf eine hochaufgelöste Simulation mit 768×768 Gitterzellen für <i>PincFlow mit SI</i>	52
3.5	Relative L_2 und L_∞ Fehler von ρ , u und v für den Testfall eines glatten Wirbels in Bezug auf eine hochaufgelöste Simulation mit 1024×1024 Gitterzellen für <i>PincFlow mit SI</i>	53
3.6	Zeitliche Entwicklung des absoluten Maximums der vertikalen Geschwindigkeit für den Testfall ruhender Atmosphären für <i>PincFlow mit SI</i>	55
3.7	Potentielle Temperaturstörung für den Testfall nicht-hydrostatischer Schwerewellen für <i>PincFlow mit SI</i> sowie <i>PincFlow mit RK3</i>	56
3.8	Potentielle Temperaturstörungen für die Testfälle hydrostatischer und planetarer Schwerewellen für <i>PincFlow mit SI</i>	58
3.9	Relative L_2 und L_∞ Fehler von ρ , u und w für den Testfall nicht-hydrostatischer Schwerewellen für <i>PincFlow mit SI</i> unter Anwendung konstanter Zeitschrittweiten	60
3.10	Potentielle Temperaturstörung für den Testfall einer kalten Blase für <i>PincFlow mit SI</i> sowie <i>PincFlow mit RK3</i>	62

3.11	Horizontaler Querschnitt der potentiellen Temperaturstörung für den Testfall einer kalten Blase für <i>PincFlow mit SI</i>	63
3.12	Vergleich der vordersten Position und maximalen Amplitude der potentiellen Temperaturstörung für den Testfall einer kalten Blase	64
3.13	Zonal gemittelte potentielle Temperatur- und vertikale Impulsprofile für den Testfall einer Heizschicht für <i>PincFlow mit SI</i>	65
3.14	Potentielle Temperatur und vertikale Geschwindigkeit für den Testfall einer lokalen Heizblase für <i>PincFlow mit SI</i> und <i>PincFlow mit RK3</i> zu den Zeitpunkten $t = 125, 250$ und 375 s	67
3.15	Potentielle Temperatur und vertikale Geschwindigkeit für den Testfall einer lokalen Heizblase für <i>PincFlow mit SI</i> und <i>PincFlow mit RK3</i> zum Zeitpunkt $t = 500$ s	68
3.16	Zeitschrittweite in Abhängigkeit der Zeitschleifeniteration für den Testfall einer Heizschicht mit lokaler Heizblase für <i>PincFlow mit SI</i>	69
3.17	Potentielle Temperatur und vertikaler Impuls für den Testfall einer Heizschicht mit lokaler Heizblase für <i>PincFlow mit SI</i>	70
4.1	Anfängliche, zonal gemittelte ρ_{eq} , u_{eq} , θ_{eq} und π'_{eq} für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen.	75
4.2	Zeitreihe von u_{RMSE} für den Testfall eines stationären Gleichgewichtszustandes	76
4.3	Horizontaler Querschnitt der potentiellen Temperatur, des horizontales Geschwindigkeitsfeldes und der gefilterte horizontale Geschwindigkeitsdivergenz für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen .	79
4.4	Zeitreihe der TKE und APE in der Troposphäre der nördlichen Hemisphäre für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	80
4.5	Zonal gemitteltes vertikales Geschwindigkeitsfeld zum Zeitpunkt $t = 2.5$ h für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	82
4.6	Vertikaler Querschnitt w' zum finalen Integrationszeitpunkt für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	83
4.7	Zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelte Felder u und $g(c_p\bar{\theta})^{-1}\theta'/\bar{\theta}$ für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	84
4.8	Zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelte Felder $c_p\bar{\theta}/f \partial\pi'/\partial y$ und $\partial\pi'/\partial z$ für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	84

4.9	Zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelte Felder u und θ sowie deren Abweichung vom Anfangszustand für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	85
4.10	Zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelte, gefilterte Terme der zonalen Impulsgleichung für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	88
4.11	Zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelte, gefilterte Terme der zonalen Impulsgleichung für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen mit gröberskaligem Fourierfilter	89
D.1	Potentielle Temperatur für den Testfall eines brechenden Schwerewellenpakets für <i>PincFlow mit SI</i> ohne Shapiro-Filter	104
D.2	Potentielle Temperatur für den Testfall eines brechenden Schwerewellenpakets für <i>PincFlow mit SI</i> mit Shapiro-Filter	105
E.1	Zonal gemittelte ρ , u , θ und π' an Tag 20 für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen mit Limiterfunktion.	112

Tabellenverzeichnis

2.1	Zusammenfassung der physikalischen Parameterwerte	22
3.1	Dichtemaximum für den Testfall eines glatten Wirbels für <i>PincFlow mit SI</i>	44
3.2	Relative L_2 und L_∞ Fehler und Konvergenzraten von ρ , u und v für den Testfall eines glatten Wirbels in Bezug auf die Anfangsbedingungen für <i>PincFlow mit SI</i>	48
3.3	Relative L_2 und L_∞ Fehler und Konvergenzraten von ρ , u und v für den Testfall eines glatten Wirbels in Bezug auf hochaufgelöste Simulationen für <i>PincFlow mit SI</i>	51
3.4	Vergleich der Maxima und Minima von u , θ und π' für den Testfall nicht-hydrostatischer Schwerewellen	57
3.5	Vergleich der relativen Fehler der Erhaltungsgrößen für den Testfall nicht-hydrostatischer Schwerewellen	58
3.6	Vergleich der Länge eines Zeitschrittes, Modelllaufzeit und Anzahl an Iterationen des Drucklösers für die Testfälle der Trägheitsschwerewellen	59
3.7	Maxima und Minima von θ und ρw für den Testfall einer Heizschicht mit lokaler Heizblase für <i>PincFlow mit SI</i>	70
4.1	Vergleich der Länge eines Zeitschrittes und Anzahl an Iterationen des Drucklösers für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen	81

Kapitel 1

Einleitung

*We are at the very beginning of time for the human race.
It is not unreasonable that we grapple with problems.
But there are tens of thousands of years in the future.
Our responsibility is to do what we can, learn what we can,
improve the solutions, and pass them on.*

– Richard P. Feynman

1.1 Motivation

Interne Schwerewellen (engl.: *internal gravity waves*) sind kleinskalige Oszillationen meteorologischer Parameter wie die Dichte, Temperatur und Windgeschwindigkeit, welche im Zusammenspiel mit der Schwerkraft durch vertikale Auslenkung innerhalb stabiler Schichtungsverhältnisse entstehen (Holton, 2004) und einen maßgeblichen Einfluss auf die atmosphärische und ozeanische Dynamik¹ haben (Holton, 1982, 1983; Holton et al., 1995; Fritts und Alexander, 2003; Kim et al., 2003).

Eine Vielzahl atmosphärischer Schwerewellen entstehen in der Troposphäre (Kim et al., 2003) und transportieren ihren Impuls und ihre Energie anschließend sowohl horizontal als auch vertikal (Hines, 1974) in die mittlere Atmosphäre, welche wiederum die Troposphäre auf saisonalen und längeren Zeitskalen beeinflusst (z.B. Baldwin et al., 2001; Scaife et al., 2012; Kidston et al., 2015; Baldwin et al., 2021; Martin et al., 2021). Schwerewellen werden allgemein in zwei Kategorien² unterteilt: Zum einen in orographische

¹Der Fokus der vorliegenden Arbeit liegt auf der Atmosphärendynamik.

²Eine Übersicht über die wichtigsten Anregungsmechanismen von Schwerewellen liefert beispielsweise die Arbeit von Fritts und Alexander (2003).

Schwerewellen, welche durch die Überströmung von Gebirgen entstehen (McFarlane, 1989). Zum anderen in nicht-orographische Schwerewellen, welche häufig durch konvektive Vorgänge angeregt (Song und Chun, 2008) oder in atmosphärischen Strahlströmen und Wetterfronten (sog. *Jet-Front Systeme*) spontan emittiert werden (Plougonven und Zhang, 2014).

Aufgrund der mit der Höhe abnehmenden Dichte wächst die Amplitude der Wellen während der vertikalen Ausbreitung exponentiell an, bis diese schließlich brechen und ihren Impuls und Energie in der Höhe deponieren. Auf diese Weise beeinflussen sie maßgeblich die großräumige Zirkulation und Variabilität in der mittleren Atmosphäre (z.B. Fritts, 1989; Fritts und Alexander, 2003; Bölöni et al., 2016) und stellen somit ein Schlüsselement für das Wetter- und Klimageschehen dar (z.B. Holton et al., 1995; Plougonven und Zhang, 2014). Unter anderem beeinflussen Schwerewellen die meridionale Temperaturverteilung in der mittleren Atmosphäre (Fritts und Alexander, 2003), die Brewer Dobson Zirkulation und damit auch den atmosphärischen Spurenstofftransport (Alexander und Rosenlof, 1996). Die Berücksichtigung der Schwerewellendynamik in der numerischen Wettervorhersage und Klimamodellierung ist daher von wesentlicher Bedeutung (McLandress, 1998).

Aufgrund der Kleinskaligkeit der Schwerewellen und ihrer komplexen Erzeugungsmechanismen, welche ein breites räumliches und zeitliches Spektrum umfassen, ist es in den derzeit verfügbaren Wetter- und Klimamodellen jedoch nicht möglich, das gesamte Schwerewellenspektrum explizit darzustellen (Kim et al., 2003). Daher müssen diese durch geeignete Subgitterskalenparametrisierungen³ berücksichtigt werden. Während in den letzten Jahrzehnten physikalisch basierte Parametrisierungen orographischer und durch Konvektion erzeugter Schwerewellen entwickelt wurden (z.B. Palmer et al., 1986; McFarlane, 1989; Song und Chun, 2008; Kim et al., 2013), stellt die derzeit noch strömungsunabhängige und stark angepasste Beschreibung der spontanen Schwerewellenaktivität (z.B. de la Cámara und Lott, 2013), welche in Jet-Front Systemen beobachtet wird, innerhalb der Modelle weiterhin einen großen Unsicherheitsfaktor dar (Amiramjadi et al., 2020). Es ist daher notwendig, ein genaueres physikalisches Verständnis des Lebenszyklus (von der Entstehung bis zur Dissipation) sowie den entsprechenden Einfluss dieser Wellen auf die großskalige Strömung zu erlangen (z.B. Plougonven und Zhang, 2014, und Referenzen darin).

Zur Untersuchung der Charakteristiken von Schwerewellen werden unterschiedliche Methodiken verwendet. Einerseits werden atmosphärische Messungen (z.B. Strelnikova et al.,

³Die Arbeit von Kim et al. (2003) liefert eine gute Übersicht über Schwerewellenparametrisierungen in Wetter- und Klimamodellen.

2021) und Laborexperimente (z.B. Rodda et al., 2020) durchgeführt, welche andererseits durch theoretische Studien (z.B. Schlutow und Wahlén, 2020) und numerische Simulationen (z.B. Hien et al., 2018) ergänzt werden. Aufgrund der zahlreichen Details ist es jedoch in beiden Fällen schwierig, die verschiedenen ablaufenden dynamischen Prozesse ausreichend zu unterscheiden, weshalb sich numerische Studien idealisierter Szenarien, die eine Hierarchie von Modellen mit zunehmender Komplexität verwenden, in diesem Zusammenhang als besonders geeignet herausstellen (Held, 2005).

Eine besondere Herausforderung zur Erforschung der Schwerewellendynamik stellt die Wechselwirkung zwischen den mesoskaligen Schwerewellen und der synoptischskaligen Strömung dar (z.B. Fritts und Alexander, 2003), welche oftmals hochaufgelöste numerische Simulationen über große Modelldomänen erfordern. Beispielsweise wurden zur näheren Untersuchung der spontanen Abstrahlung interner Schwerewellen bereits in zahlreichen Arbeiten (z.B. O’Sullivan und Dunkerton, 1995; Zhang, 2004; Viúdez und Dritschel, 2006; Wang und Zhang, 2007; Plougonven und Snyder, 2007; de la Cámara und Lott, 2013; Borchert et al., 2014; Kim et al., 2016; Hien et al., 2018; Polichtchouk und Scott, 2020) idealisierte barokline Wellen und die dazugehörigen atmosphärenähnlichen Jet-Front Systeme modelliert.

Viele dieser Studien betrachten jedoch lediglich das Anfangswertproblem der Störung einer baroklin instabilen großskaligen Strömung, so dass die Schwerewellenaktivitäten sowie deren Quellregionen eine Abhängigkeit von den gewählten Anfangsbedingungen der Simulationen aufweisen. Beispielsweise fanden Plougonven und Snyder (2007) durch einen Vergleich von Simulationen zweier deutlich unterschiedlicher barokliner Lebenszyklen heraus, dass Schwerewellenaktivitäten in unterschiedlichen Quellregionen zu erkennen sind, denen möglicherweise unterschiedliche Anregungsmechanismen zugrunde liegen. Außerdem beobachteten Wang und Zhang (2007) in mesoskaligen Simulationen unterschiedlicher idealisierter barokliner Lebenszyklen eine Abhängigkeit der Schwerewellencharakteristiken von der Baroklinität der großskaligen Strömung. Eine Option um dieser Problematik entgegen zu treten bieten numerische Simulationen mehrfacher barokliner Lebenszyklen, bei denen die barokline Instabilität mit Hilfe einer Heizung, welche die Wirkung der Sonnenstrahlung nachahmt, wiederholt neu aufgebaut wird.

Eine weitere Problematik stellt die Separation des Schwerewellenanteils von der gesamten Strömung dar. Da notwendigerweise nicht alle mesoskaligen Strömungen als Schwerewellen interpretiert werden können, ist diese für eine möglichst präzise Analyse der Quellen und Charakteristiken der Schwerewellen sowie deren Wechselwirkung mit der großskaligen, baroklinen Strömung von zentraler Bedeutung (Vanneste, 2013; Plougonven und Zhang, 2014). Wenn auch eine exakte Aufspaltung der Strömung in einen unbalancier-

ten Anteil, der das Schwerewellensignal enthält, und einen verbleibenden balancierten Anteil mathematisch nicht möglich ist (Vanneste, 2013), finden sich in zahlreichen Arbeiten verschiedenste Ansätze von unterschiedlicher Komplexität dazu, welche sich über einfache, gleitende Volumenmittel (z.B. Borchert et al., 2014) und lineare Analysen (z.B. Hien et al., 2018) bis hin zu Gleichgewichtsbeziehungen höherer Ordnung erstrecken (z.B. McIntyre und Norton, 2000). Nichtsdestotrotz scheint eine möglichst eindeutige Zerlegung womöglich nur durch ein integrales Modell realisierbar, welches alle betroffenen Höhen umfasst⁴. Darüber hinaus scheint es für eine möglichst einfache Aufspaltung der Strömung von Vorteil zu sein, die Näherung einer tangentialen f -Ebene (der Coriolisparameter f ist konstant) und somit eine vereinfachte Modellgeometrie anzunehmen, da diese im Vergleich zu einer realistischen Atmosphäre eine deutlich geringere Anzahl an Freiheitsgraden besitzt (Achatz et al., 2017).

Folglich sind idealisierte Simulationen der Atmosphärendynamik über lange Zeiträume und große Modelldomänen auf der f -Ebene, welche dennoch den gesamten Lebenszyklus von Schwerewellen (von deren Entstehung bis hin zur Dissipation) beinhalten und darüber hinaus effizient sind, sehr wünschenswert um die Unsicherheiten weiter zu reduzieren. In den nachfolgenden Abschnitten wird zunächst eine Übersicht über numerische Simulationsverfahren aus der Literatur gegeben, bevor eine nähere Erläuterung über das Ziel dieser Arbeit sowie deren Strukturierung vorgenommen wird.

1.2 Stand der Wissenschaft

Die Modellierung atmosphärischer Strömungen (Cullen, 2007; Durran, 2010) unter Verwendung der vollkompressiblen, nichthydrostatischen Bewegungsgleichungen (Holton, 2004) stellt angesichts des breiten räumlichen und zeitlichen Spektrums der atmosphärischen Prozesse (Klein, 2010) noch immer eine große Herausforderung und einen hohen numerischen Aufwand dar. Trotz der stetig zunehmenden Rechenleistung der Computer bleibt es in Bezug auf die Effizienz der numerischen Modelle vorteilhaft, Schallwellen aus der Dynamik herauszufiltern (Marras et al., 2016). Einerseits wird deren Einfluss auf die atmosphärische Strömung als vernachlässigbar angesehen, andererseits liegen diese außerhalb des Fokus der vorliegenden Arbeit. In diesem Zusammenhang stellt sich die numerische Approximation schallwellen-gefilterter Gleichungssysteme (Durran, 2008; Klein, 2009) als geeignet heraus, welche im Vergleich zu den vollkompressiblen Modellen in der numerischen Integration größere Zeitschrittweiten zulassen und somit eine effizientere Modellierung atmosphärischer Prozesse (Achatz et al., 2010), wie beispielsweise

⁴Ähnliche Überlegungen gelten auch für andere Anregungsmechanismen von Schwerewellen.

die Dynamik von internen Schwerewellen (Fritts und Alexander, 2003), ermöglichen. Eine Methode zur Filterungen von Schallwellen bietet die Boussinesq-Näherung (Boussinesq, 1903). Dabei wird für atmosphärische Prozesse, deren Skalen deutlich kleiner sind als die Skalenhöhe der Atmosphäre, eine näherungsweise konstante Referenzdichte angenommen. Die Dichte muss somit nicht mehr prognostiziert werden und ihre prognostische Gleichung wird stattdessen durch eine diagnostische Divergenzbedingung für das Windfeld ersetzt. Ein Nachteil dieser Näherung ist jedoch, dass die Dichteabnahme mit der Höhe in der realen Atmosphäre und somit das dichtebedingte Wachstum der Amplitude von Schwerewellen vernachlässigt wird (Achatz et al., 2010). Dadurch kann deren Einfluss auf die großräumige Zirkulation in der mittleren Atmosphäre (Holton et al., 1995; Fritts und Alexander, 2003) nicht ausreichend reproduziert werden.

Im Gegensatz dazu stellen die anelastischen Gleichungen (Batchelor, 1953; Ogura und Phillips, 1962) und die pseudo-inkompressiblen Gleichungen (Durrant, 1989) zwei weitere schallfreie Gleichungssysteme dar. Ähnlich zu den Boussinesq-Gleichungen beinhalten diese jeweils eine diagnostische Divergenzbedingung, berücksichtigen jedoch die Dichteabnahme der Referenzatmosphäre mit der Höhe und können somit das Amplitudenwachstum der Schwerewellen beschreiben, weshalb diese allgemein besser für die Analyse der Schwerewelldynamik geeignet sind⁵. In der Literatur sind bereits eine Vielzahl von Untersuchungen zur Nützlichkeit dieser Gleichungssysteme vorhanden, wie beispielsweise die Arbeiten von Bannon (1996); Davies et al. (2003); Smolarkiewicz und Dörnbrack (2008); Klein (2009); Klein et al. (2010) und Achatz et al. (2010). So dokumentieren Smolarkiewicz und Dörnbrack (2008) die Anwendbarkeit der pseudo-inkompressiblen Gleichungssysteme zur Simulation barokliner Wellen. Außerdem zeigen Klein (2009) und Achatz et al. (2010), dass die pseudo-inkompressiblen Gleichungen in führender Ordnung der Mach-Zahl mit den vollkompressiblen Gleichungen konsistent sind und im Unterschied zu den anelastischen Gleichungen auch in einer Atmosphäre mit variierender Schichtung gültig sind und bestätigten somit die Eignung der pseudo-inkompressiblen Gleichungen zur Untersuchung der Multiskalen-Dynamik interner Schwerewellen.

Weiterhin können zur Steigerung der Effizienz der numerischen Modelle unter anderem⁶ split-explizite (z.B. Klemp und Wilhelmson, 1978), voll-implizite (z.B. Reisner et al., 2005) oder semi-implizite (z.B. Tapp und White, 1976) Zeitintegrationsverfahren verwendet werden, welche im Vergleich zu voll-expliziten Diskretisierungsmethoden nicht durch Stabilitätskriterien in Abhängigkeit der schnellen Prozesse beschränkt sind. So ist

⁵Siehe beispielsweise Achatz et al. (2010) und Klein et al. (2010) zum Gültigkeitsbereich dieser schallwellen-gefilterter Näherungen.

⁶Eine gute Übersicht über aktuelle Zeitintegrationsschemata in Wetter- und Klimamodellen bieten Mengaldo et al. (2019).

beispielsweise die Zeitschrittweite expliziter Modelle der vollkompressiblen Gleichungen durch die Geschwindigkeit der Schallwellen begrenzt (Courant et al., 1928), während die Länge des Zeitschritts in pseudo-inkompressiblen Modellen zur Vermeidung von numerischen Instabilitäten oft durch die kleinskaligen Schwingungen von Schwerewellen begrenzt wird (Rieper et al., 2013). Voll-implizite Methoden können hingegen auch unter Anwendung sehr großer Zeitschrittweiten, welche das Courant-Friedrich-Levy Kriterium⁷ überwinden können, numerisch stabil bleiben, erfordern jedoch meist einen hohen Rechenaufwand (Mengaldo et al., 2019). Im Rahmen split-expliziter Verfahren werden die rechten Seiten der Bewegungsgleichungen in langsame und schnelle Prozesse separiert und jeweils auf unterschiedlichen Zeitebenen integriert. Ein Nachteil dieser Methodik ist allerdings, dass zur Stabilisierung der implementierten Schemata häufig eine zusätzliche Dämpfung benötigt wird (Skamarock und Klemp, 1992; Jebens et al., 2009). Auf ähnliche Weise werden im Rahmen semi-impliziter Zeitschrittverfahren die schnellen Prozesse von den langsamen getrennt, jedoch werden dabei erstere implizit gelöst, während letztere mit einer expliziten Methode integriert werden. Zur Vereinfachung der Diskretisierung wird das Gleichungssystem dabei häufig mit Hilfe von Störgrößen, welche die Abweichung von einer Referenzatmosphäre angeben, formuliert (Restelli und Giraldo, 2009; Smolarkiewicz et al., 2014, 2019). Semi-implizite Verfahren ermöglichen somit unter Anwendung von großen Zeitschrittweiten stabile Simulationen auf sehr weiträumigen Modellgebieten und über lange Zeiträume hinweg und stellen eine bewährte Methodik zur Steigerung der numerischen Effizienz von Modellen dar (Smolarkiewicz und Margolin, 1997; Bonaventura, 2000; Giraldo et al., 2013; Benacchio et al., 2014; Benacchio und Klein, 2019). Zu beachten ist allerdings, dass die gesteigerte Effizienz zu Lasten einer Verlangsamung der schnellsten Wellen geht (Simmons et al., 1978), weshalb diese bei der Anwendung semi-impliziter Verfahren lediglich einen zu vernachlässigbaren Beitrag leisten sollten.

1.3 Ziel der Arbeit

Ziel der vorliegenden Arbeit ist 1) unter Vernachlässigung von Schallwellen, 2) Berücksichtigung einer Wärmequelle und 3) durch Anwendung eines semi-impliziten Zeitschrittintegrationsschemas die Entwicklung eines möglichst einfachen, jedoch atmosphärenähnlichen numerischen Algorithmus für die effiziente Modellierung der Dynamik interner Schwerewellen sowie deren Einfluss auf die Zirkulation der mittleren Atmosphäre.

⁷Durch das Courant-Friedrich-Levy Kriterium (Courant et al., 1928) wird ein Zusammenhang zwischen der maximal möglichen Zeitschrittweite Δt , der räumlichen Auflösung Δx und der Advektionsgeschwindigkeit u hergestellt, d.h. $(|u| \Delta t / \Delta x) \leq 1$.

In der Arbeit von Rieper et al. (2013) wurde zur Untersuchung der Dynamik atmosphärischer Schwerewellen - von der Entstehung der Wellen, über deren sukzessives Amplitudenwachstum bis hin zur Brechung und Dissipation - auf der f -Ebene ein pseudo-inkompressibles Finite-Volumen-Modell mit implizitem Turbulenzmodell (engl.: *pseudo-incompressible flow solver with implicit turbulence model*, PincFloit) auf einem versetzten Gitter entwickelt, welches das schallfreie Gleichungssystem von Durran (1989) löst. PincFloit wurde anschließend zur Entwicklung und Validierung geeigneter Strategien zur Parametrisierung subgitterskaliger Schwerewellen genutzt, wie beispielsweise die Arbeiten von Bölöni et al. (2016) und Wei et al. (2019) dokumentieren. Allerdings wurde dabei nicht das volle Potenzial des Modells ausgeschöpft. Zum einen konnten in den bisherigen Anwendungen lediglich adiabatische Prozesse modelliert werden, zum anderen wurde die Effizienz des Modells durch die Verwendung eines expliziten Runge-Kutta Verfahrens dritter Ordnung, welches unter anderem eine Stabilitätsbedingung in Abhängigkeit der Oszillationen von Schwerewellen benötigt, beschränkt.

An die vorherigen Abschnitte anschließend wird in der vorliegenden Arbeit pincFloit (Rieper et al., 2013) durch zwei wesentliche Komponenten erweitert:

1. Zur Steigerung der Effizienz wird ein semi-implizites Zeitschrittverfahren zur Integration der Auftriebs- und Coriolisterme implementiert. Dessen Diskretisierung basiert auf den Methoden von Smolarkiewicz und Margolin (1997) und Benacchio und Klein (2019), wird jedoch auf das versetzte Gitter angepasst.
2. Zur Berücksichtigung von Austauschprozessen externer Wärmequellen wird das pseudo-inkompressible Modell mit Hilfe einer Methodik zum Einbezug diabatischer Effekte, die vor einigen Jahren basierend auf den Arbeiten von Almgren et al. (2006, 2008) in der Studie von O’Neill und Klein (2014) entwickelt wurde, erweitert. Anders als in der Arbeit von Durran (1989), wird dabei zur Kompensation der Heizeffekte eine zeitliche Variation der hydrostatischen Hintergrundströmung zugelassen.

Der Einfachheit halber wird das erweiterte Modell im Folgenden als *PincFlow* bezeichnet⁸.

Zur Validierung der Implementierung von *pincFlow* werden anschließend eine Reihe zweidimensionaler atmosphärischer Standardtestfälle durchgeführt, wobei insbesondere die Genauigkeitsordnung und Stabilität des Verfahrens untersucht wird. Außerdem werden die Modellresultate anhand von Ergebnissen aus der Literatur verifiziert und die Leistungsfähigkeit von *pincFlow* wird durch Vergleich der Ergebnisse mit Resultaten einer

⁸In dieser Arbeit wird außerdem die Verwendung des impliziten Turbulenzmodells aufgegeben.

expliziten Zeitintegration bewertet. Im Anschluss daran wird, basierend auf der Konfiguration von Held und Suarez (1994), ein erster drei-dimensionaler Anwendungstestfall zur Modellierung der idealisierten Dynamik barokliner Wellen in den mittleren Breiten über mehrere Monate durchgeführt. Dabei werden die Modellgleichungen zur Erzeugung eines baroklin instabilen Strömungsprofils in der Troposphäre durch eine thermische Relaxation zu einem konstanten zonal-symmetrischen sowie geostrophisch und hydrostatisch balancierten Gleichgewichtszustand ergänzt und es werden, wie von Smolarkiewicz et al. (2001) und Prusa et al. (2008) beschrieben, die rechten Seiten der Differentialgleichungen als Abweichung dieses Zustandes formuliert, da andererseits durch die räumliche numerische Diskretisierung der Felder auf dem versetzten Modellgitter die geostrophisch balancierte Jetströmung nicht ausreichend repräsentiert werden kann.

1.4 Aufbau der Arbeit

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Im nachfolgenden Kapitel 2 werden zunächst die physikalischen und mathematischen Grundlagen vorgestellt. Dies beinhaltet die allgemeinen Navier-Stokes-Gleichungen und eine Herleitung der schallfreien pseudo-inkompressiblen Näherung sowie die Entwicklung des zeitabhängigen Hintergrundzustandes. Im Anschluss daran wird das numerische Modell *pincFlow* detailliert vorgestellt. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf der Behandlung des numerischen Zeitintegrationsverfahrens sowie der räumlichen numerischen Diskretisierung. Anschließend werden in Kapitel 3 eine Reihe zwei-dimensionaler atmosphärischer Standardtestfälle simuliert, welche *pincFlow* auf seine Funktionsweise hin überprüfen. Zuerst wird in 3.1 das semi-implizite Zeitintegrationsverfahren mit konstantem Hintergrundzustand untersucht, wobei insbesondere dessen numerisches Konvergenzverhalten sowie Stabilität und Effizienz evaluiert wird. Auf dieser Basis erfolgt anschließend in Kapitel 3.2 die Auswertung der Entwicklung des zeitabhängigen Hintergrundzustandes anhand diabatischer Testfälle. Ferner wird in Kapitel 4 die Stationarität des Modells überprüft, bevor die Simulationsergebnisse eines drei-dimensionalen Anwendungstestfalls barokliner Instabilität vorgestellt werden. In Kapitel 5 wird abschließend eine Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse gegeben.

Kapitel 2

Das Modell

*It would be possible to describe everything scientifically,
but it would make no sense; it would be without meaning,
as if you described a Beethoven symphony as a variation of wave pressure.*

– Albert Einstein

In diesem Kapitel wird ein numerisches Verfahren zur effizienten und stabilen Modellierung diabatischer Atmosphärenprozesse entwickelt. Dazu werden zunächst die kompressiblen Gleichungen, welche zur Beschreibung der Wellenausbreitung in der trockenen Atmosphäre verwendet werden, die schallfreie pseudo-inkompressible Näherung sowie die zeitliche Entwicklung des hydrostatischen Hintergrundzustandes dargestellt. Im Anschluss wird das semi-implizite Modell *PincFlow*, welches auf dem pseudo-inkompressiblen Finite-Volumen Verfahren von Rieper et al. (2013) basiert, hergeleitet. Die Ausarbeitung ist hier im Wesentlichen an die Arbeiten von Smolarkiewicz und Margolin (1997); Benacchio und Klein (2019) und O’Neill und Klein (2014) angelehnt.

2.1 Die kompressiblen Gleichungen

Zur mathematischen Beschreibung der Strömung der trockenen Atmosphäre werden die Navier-Stokes-Gleichungen verwendet (Holton, 2004). Da der Fokus dieser Arbeit auf extratropischen Wetterphänomenen liegt, wird zur Beschreibung der diabatischen Dynamik, ohne Einschränkung der Allgemeinheit, die Krümmung der Erdoberfläche vernachlässigt sowie einfachheitshalber die Approximation einer Tangentialebene mit konstantem Coriolisparameter f getroffen. Darüber hinaus werden molekulare Viskosität und Diffusion vernachlässigt.

Unter diesen Voraussetzungen lauten die prognostischen Gleichungen mit dem Effekt einer Volumenheizung Q in kartesischen Koordinaten auf der f -Ebene

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \circ \rho \mathbf{v}) = -\nabla p - f \mathbf{e}_z \times \rho \mathbf{u} - \rho g \mathbf{e}_z, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \theta \mathbf{v}) = \frac{\rho \theta}{c_p T} Q, \quad (2.3)$$

wobei x , y und z jeweils die zonale, meridionale und vertikale Richtung und t die Zeit bezeichnen. Ferner gilt die ideale Gasgleichung

$$p = \rho R T. \quad (2.4)$$

Dabei sind $\mathbf{u} = (u, v)^T$ und w die Horizontal- und Vertikalkomponenten des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{v} und die Variablen ρ , T und

$$\theta = T \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} \quad (2.5)$$

beschreiben jeweils die Dichte, die Temperatur sowie die potentielle Temperatur. Die Parameter c_p und $c_v = c_p - R$ bezeichnen die spezifische Wärmekapazitäten trockener Luft bei konstantem Druck p mit dem konstanten Referenzdruck p_{ref} und konstantem Volumen V , R stellt die spezifische Gaskonstante für trockene Luft dar und $\gamma = c_p/c_v$ ist der konstante Isentropenexponent. Darüber hinaus beschreibt g die Schwerebeschleunigung, \mathbf{e}_z bezeichnet den vertikalen Einheitsvektor, \circ kennzeichnet das Tensorprodukt und \times ist das Kreuzprodukt.

Das Gleichungssystem¹ (2.1) - (2.4) stellt im adiabatischen Fall ($Q = 0$) ein geschlossenes System dar und formuliert mathematisch die physikalischen Prinzipien der Massenerhaltung eines kompressiblen Luftteilchens durch die Kontinuitätsgleichung (2.1), der Impulserhaltung durch (2.2) sowie der Erhaltung der potentiellen Temperatur für adiabatische Prozesse (vgl. 2.3).

Die kompressiblen Bewegungsgleichungen bieten sicherlich einen Ansatz zur vollständigen Beschreibung atmosphärischer Prozesse in dynamischen Modellen. Angesichts der komplexen Wechselwirkungsprozesse zwischen unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Wellenskalen, stellt dies jedoch, trotz der stetig zunehmenden Computerrechenleistung,

¹Eine ausführliche Behandlung der Grundgleichungen der Atmosphärendynamik findet sich beispielsweise in Holton (2004).

einen hohen numerischen Aufwand dar (Marras et al., 2016). Da der Einfluss von Schallwellen auf die atmosphärische Strömung als Vernachlässigbar angesehen wird und in dieser Arbeit nicht von Interesse ist, ist es daher numerisch vorzuziehen, Schallwellen aus den Gleichungen zu filtern² (z.B. Klein, 2011, und Referenzen darin). Eine hilfreiche Vereinfachung der kompressiblen Gleichungen bietet dazu die pseudo-inkompressible Näherung (Durran, 1989), welche im folgenden Abschnitt diskutiert werden soll.

2.2 Die pseudo-inkompressible Näherung

Zur Herleitung der pseudo-inkompressiblen Gleichungen³ wird zunächst der dimensionslose Exnerdruck

$$\pi = \frac{T}{\theta} = \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^{\frac{R}{c_p}} = \left(\frac{R}{p_{ref}} \rho \theta \right)^{\frac{R}{c_v}} \quad (2.6)$$

eingeführt, sodass auf der rechten Seite der Impulsgleichung (2.2)

$$\nabla p = c_p \rho \theta \nabla \pi \quad (2.7)$$

gilt (vgl. z.B. Benacchio et al., 2014). Das grundlegende Konzept der pseudo-inkompressiblen Näherung stammt von Durran (1989). Zur Herleitung der schallfreien Näherung zerlegt der Autor zunächst die thermodynamischen Größen in ein hydrostatisches Hintergrundprofil und eine Abweichung davon, wobei ersteres nur von der Höhe abhängt. Wie von Almgren (2000) und Almgren et al. (2006) gezeigt, ist ein Nachteil dieses Ansatzes jedoch, dass durch die Annahme eines zeitunabhängigen Hintergrundzustandes die Dynamik diabatischer Prozesse nicht präzise genug simuliert werden kann, da unter anderem die thermische Expansion aufgrund der Heizeffekte nicht ausreichend repräsentiert wird. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, die Approximation zu erweitern und neben der Höhenabhängigkeit auch eine zeitliche Entwicklung des hydrostatischen Hintergrundzustandes zuzulassen (Almgren, 2000; Almgren et al., 2006, 2008; O’Neill und Klein, 2014), welche die Effekte einer Volumenheizung kompensiert. Beispielsweise wurde in der Studie von Almgren (2000) gezeigt, dass die Lösung der pseudo-inkompressiblen Gleichungen mit zeitabhängigem Hintergrund im Grenzfall einer geringen Heizrate gegen die Lösung der kompressiblen Gleichungen konvergiert.

²Dies erlaubt die Verwendung deutlich längerer numerischer Zeitintegrationsschritte (Achatz et al., 2010).

³Die Beschreibung der Herleitung orientiert sich hierbei hauptsächlich an den Arbeiten von Durran (1989, 2008); Benacchio et al. (2014) und O’Neill (2015).

Somit werden die thermodynamischen Felder $\phi = (\pi, p, \theta, \rho)$ zerlegt in

$$\phi = \bar{\phi}(z, t) + \delta\phi(x, y, z, t), \quad (2.8)$$

wobei angenommen wird, dass die Abweichungen vom zeitabhängigen Hintergrundzustand klein sind, d.h. $|\delta\pi| \ll \bar{\pi}$ (bzw. $|\delta p| \ll \bar{p}$) und

$$0 = -c_p \bar{\rho} \bar{\theta} \frac{\partial \bar{\pi}}{\partial z} - \bar{\rho} g = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} - \bar{\rho} g \quad (2.9)$$

ist (vgl. z.B. O'Neill, 2015). Die Zustandsgleichung (2.6) kann nun mit (2.8) und durch Taylorentwicklung bis zur ersten Ordnung für die Störgröße $\delta\pi$ als

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{\theta} \frac{p_{ref}}{R} \pi^{\frac{c_v}{R}} = \frac{1}{\theta} \frac{p_{ref}}{R} (\bar{\pi} + \delta\pi)^{\frac{c_v}{R}} = \frac{1}{\theta} \frac{p_{ref}}{R} \bar{\pi}^{\frac{c_v}{R}} \left(1 + \frac{\delta\pi}{\bar{\pi}}\right)^{\frac{c_v}{R}} \\ &\approx \frac{1}{\theta} \frac{p_{ref}}{R} \bar{\pi}^{\frac{c_v}{R}} \left(1 + \frac{c_v}{R} \frac{\delta\pi}{\bar{\pi}}\right) \equiv \rho^* \left(1 + \frac{c_v}{R} \frac{\delta\pi}{\bar{\pi}}\right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

approximiert werden, wobei die Variable ρ^* die sogenannte Pseudo-Dichte definiert, für welche

$$\bar{\pi} = \left(\frac{R}{p_{ref}} \rho^* \theta\right)^{\frac{R}{c_v}} = \left(\frac{R}{p_{ref}} \bar{\rho} \bar{\theta}\right)^{\frac{R}{c_v}} \quad (2.11)$$

angenommen wird, so dass die Abhängigkeit der Dichte vom Druck auf dessen Hintergrundprofil begrenzt ist und somit unter Vernachlässigung der Druckfluktuationen auf die Dichte zur Filterung der Schallwellen beiträgt (Durrant, 2008). Weiterhin gilt das Prinzip der Massenerhaltung für ρ^* , so dass sich schließlich unter Anwendung der Definition für ρ^* (und somit Vernachlässigung der Druckfluktuationen) aus den kompressiblen Gleichungen mit der massengewichteten potentiellen Temperatur

$$P = \rho^* \theta = \bar{\rho} \bar{\theta} = \bar{P} \quad (2.12)$$

die pseudo-inkompressiblen Gleichungen

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^* \mathbf{v}) = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \rho^* \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \circ \rho^* \mathbf{v}) = -c_p \rho^* \theta \nabla \pi - f \mathbf{e}_z \times \rho^* \mathbf{u} - \rho^* g \mathbf{e}_z, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \rho^* \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^* \theta \mathbf{v}) = \frac{\rho^* Q}{c_p \bar{\pi}}, \quad (2.15)$$

ergeben, wobei Gleichung (2.15) mit (2.12) zu einer diagnostischen Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld umgeformt werden kann:

$$\nabla \cdot (\bar{P}\mathbf{v}) = \frac{\rho^* Q}{c_p \bar{\pi}} - \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} \equiv S - \frac{\partial \bar{P}}{\partial t}. \quad (2.16)$$

Der Parameter S gibt einen diabatischen Heizungsterm an. Im Weiteren wird bei der Notation der Pseudo-Dichte aus Gründen der Übersichtlichkeit der hochgestellte Stern weggelassen, d.h. es wird $\rho^* = \rho$ gesetzt.

2.3 Die zeitliche Entwicklung der Hintergrundatmosphäre

Im vorherigen Abschnitt wurde die pseudo-inkompressible Näherung vorgestellt, welche durch die Vernachlässigung von Druckfluktuationen in der Dichte Schallwellen aus der Dynamik filtert, sich aber aufgrund des höhenabhängigen Dichteprofiles weiterhin für die Beschreibung von Schwerewellen eignet. Im Gegensatz zu Durran (1989) wurde dabei zur präziseren Beschreibung diabatischer Prozesse eine zeitabhängige Hintergrundatmosphäre berücksichtigt (z.B. Almgren, 2000; Almgren et al., 2006; O’Neill und Klein, 2014), deren zeitliche Entwicklung im Folgenden hergeleitet wird. Die Ausarbeitung orientiert sich im Wesentlichen an der Arbeit von O’Neill und Klein (2014).

Zunächst wird das Geschwindigkeitsfeld in ein horizontal gemittelt⁴ vertikales Windprofil und eine Abweichung davon, welche die verbleibende lokale Dynamik bestimmt, zerlegt (Almgren et al., 2006, 2008; O’Neill und Klein, 2014)

$$\mathbf{v} = \langle w \rangle(z, t) \mathbf{e}_z + \delta \mathbf{v}(x, y, z, t). \quad (2.17)$$

Dabei wird angenommen, dass die Änderungsraten des vertikalen Flusses aufgrund der Heizung vollständig durch $\langle w \rangle$ berücksichtigt werden, sodass

$$\int_{\Omega_H} (\delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_z) dA = 0 \quad (2.18)$$

gilt, wobei der Parameter Ω_H einen zweidimensionalen Raum beschreibt und dA das zugehörige Flächenmaß bezeichnet (Almgren et al., 2006).

Unter der zusätzlichen Annahme von horizontal periodischen Randbedingungen, kann mittels der Berechnung des horizontalen Mittelwertes von (2.16) eine prognostische Gleichung für den Hintergrund der Form

⁴Der horizontale Mittelwert wird in dieser Arbeit durch die spitzen Klammern gekennzeichnet, d.h. $\langle \cdot \rangle = \left(\int_{\Omega_H} dA \right)^{-1} \int_{\Omega_H} (\cdot) dA$.

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{P} \langle w \rangle}{\partial z} = \langle S \rangle, \quad (2.19)$$

abgeleitet werden (O'Neill und Klein, 2014). Folglich muss die Divergenzbedingung

$$\nabla \cdot [\bar{P}(\mathbf{v} - \langle w \rangle)] = S - \langle S \rangle \quad (2.20)$$

gelten⁵ (vgl. 2.16). In Anlehnung an O'Neill und Klein (2014) wird nun zur Herleitung einer diagnostischen Gleichung für $\langle w \rangle$ zunächst mit Hilfe der Zustandsgleichung (2.11)

$$\bar{P} = \rho \theta = \bar{\rho} \bar{\theta} = \frac{p_{ref}}{R} \bar{\pi}^{\frac{1}{\gamma-1}} = \frac{p_{ref}}{R} \left(\frac{\bar{p}}{p_{ref}} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (2.21)$$

\bar{P} über \bar{p} ausgedrückt, so dass mit der vertikalen materiellen Ableitung

$$\frac{\bar{D}}{\bar{D}t} = \frac{\partial}{\partial t} + \langle w \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.22)$$

die prognostische Gleichung (2.19) zu

$$\begin{aligned} \langle S \rangle &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle w \rangle \frac{\partial}{\partial z} \right) \bar{P} + \bar{P} \frac{\partial \langle w \rangle}{\partial z} \\ &= \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{p}} \frac{\bar{D} \bar{p}}{\bar{D}t} + \bar{P} \frac{\partial \langle w \rangle}{\partial z} \\ &= \bar{P} \left(\frac{1}{\gamma \bar{p}} \frac{\bar{D} \bar{p}}{\bar{D}t} + \frac{\partial \langle w \rangle}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.23)$$

umgeformt werden kann. Die Gleichung (2.23) bestimmt das Verhältnis zwischen der vertikalen Änderungsrate von $\langle w \rangle$ zusammen mit der vertikalen materiellen Ableitung des Hintergrunddrucks und der horizontal gemittelten Heizungsrate. Weiterhin wird angenommen, dass die Hintergrunddichte die Kontinuitätsgleichung erfüllt (vgl. O'Neill und Klein, 2014), d.h.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \langle w \rangle}{\partial z} = 0. \quad (2.24)$$

Vertikale Integration des hydrostatischen Gleichgewichts (2.9) bis zum oberen Rand $z = H$ der betrachteten Domäne

⁵Die Gleichung (2.20) erhält man durch Subtraktion der Gleichung (2.28) von (2.16).

$$\bar{p}^{top} - \bar{p}(z, t) = -g \int_z^H \bar{\rho}(z', t) dz', \quad (2.25)$$

wobei $\bar{p}^{top} = \bar{p}(H, t)$ und anschließende Anwendung der vertikalen materiellen Ableitung (2.22) liefert somit unter Berücksichtigung eines undurchlässigen, festen Deckels am oberen Rand der Modelldomäne (sogenannte *solid-wall* Randbedingung, $\langle w \rangle^{top} = 0$, vgl. Abschnitt 2.4.4) das Ergebnis (vgl. Gleichung (17) in O'Neill und Klein, 2014)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} - \frac{\overline{D\bar{p}}(z, t)}{\overline{Dt}} &= - \int_z^H dz' g \frac{\partial \bar{\rho}(z', t)}{\partial t} + g \langle w \rangle \bar{\rho} \\ &= g [(\bar{\rho} \langle w \rangle)^{top} - \bar{\rho}(z, t) \langle w \rangle(z, t)] + g \langle w \rangle(z, t) \bar{\rho}(z, t) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2.26)$$

so dass sich aus (2.23)

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial z} = \frac{\langle S \rangle}{\overline{P}} - \frac{1}{\gamma \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} \quad (2.27)$$

ergibt. Schließlich errechnet sich daraus zusammen mit

$$\frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} = \frac{\int_0^H dz \frac{\langle S \rangle}{\overline{P}}}{\int_0^H dz \frac{1}{\gamma \bar{p}}} \quad (2.28)$$

das vertikale Geschwindigkeitsprofil (vgl. Gleichung (19) in O'Neill und Klein, 2014)

$$\langle w \rangle(z, t) = \int_0^z dz' \left(\frac{\langle S \rangle}{\overline{P}} - \frac{1}{\gamma \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} \right). \quad (2.29)$$

Abschließend wird noch kurz der alternative Ansatz (analog zu Almgren et al., 2008) skizziert, die Hintergrunddichte durch die Zerlegung in ein zeitlich konstantes Profil und das horizontale Mittel der gesamten Dichte, d.h. $\bar{\rho}(z, t) = \rho_s(z) + \langle \rho \rangle(z, t)$, ausdrücken, sodass man über die horizontal gemittelte Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} = - \frac{\partial \langle \rho w \rangle}{\partial z} \quad (2.30)$$

sowie die Zerlegung $\rho = \bar{\rho} + \rho'$ und $w = \langle w \rangle + w'$ für die Hintergrunddichte eine prognostische Gleichung der Form (anstelle von Gleichung 2.24)

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \langle w \rangle}{\partial z} + \frac{\partial \langle \rho' w' \rangle}{\partial z} = 0 \quad (2.31)$$

erhält, welche Gleichung (29) in Almgren et al. (2008) entspricht. Aus dieser ergibt sich zusammen mit der vertikalen materiellen Ableitung der Gleichung (2.25) sowie (2.23)

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial z} - \frac{g \bar{\rho}}{\gamma \bar{p}} \langle w \rangle = \frac{\langle S \rangle}{\bar{P}} + \frac{g \langle \rho w \rangle}{\gamma \bar{p}} - \frac{1}{\gamma \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t}, \quad (2.32)$$

woraus schließlich zusammen mit (anstelle von Gleichung 2.28)

$$\frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} = \frac{\int_0^H dz e^{-\frac{g \bar{\rho}}{\gamma \bar{p}} z} \left(\frac{\langle S \rangle}{\bar{P}} + \frac{g \langle \rho w \rangle}{\gamma \bar{p}} \right)}{\int_0^H dz e^{-\frac{g \bar{\rho}}{\gamma \bar{p}} z} \frac{1}{\gamma \bar{p}}} \quad (2.33)$$

ein vertikales Geschwindigkeitsprofil der Form (anstelle von Gleichung 2.29)

$$\langle w \rangle(z, t) = \int_0^z dz' e^{-\frac{g \bar{\rho}}{\gamma \bar{p}}(z'-z)} \left(\frac{\langle S \rangle}{\bar{P}} + \frac{g \langle \rho w \rangle}{\gamma \bar{p}} - \frac{1}{\gamma \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} \right) \quad (2.34)$$

errechnet werden kann. Jedoch führte eine Implementierung dieses Ansatzes in das numerische Verfahren (vgl. den nachfolgenden Abschnitt) zu keinen zufriedenstellenden Ergebnissen. Insbesondere konnte bereits nach wenigen Zeitschritten beobachtet werden, dass das Modell divergiert und folglich abbricht, weshalb im Weiteren die Methodik von O'Neill und Klein (2014) verwendet wird.

2.4 Das numerische Modell

You never change things by fighting the existing reality.

To change something, build a new model that makes the existing model obsolete.

– Richard Buckminster Fuller

In den vorherigen Abschnitten wurden die pseudo-inkompressiblen Grundgleichungen, welche zur schallfreien Approximation diabatischer Atmosphärenprozesse dienen, dargestellt. Anders als in Durran (1989) wurde dabei, basierend auf der Arbeit von O'Neill und Klein (2014), eine zeitliche Entwicklung des Hintergrundzustandes zugelassen, welche zur Kompensation der Heizeffekte dient und somit eine präzisere Beschreibung der Dynamik durch die genäherten Gleichungen ermöglicht. Eine Möglichkeit zur numerischen

Modellierung atmosphärischer Dynamik unter Anwendung der pseudo-inkompressiblen Gleichungen bietet das Finite-Volumen-Verfahren⁶ von Rieper et al. (2013). Allerdings berücksichtigt das Modell bisher nur adiabatische Prozesse. Darüber hinaus erweist es sich aufgrund der Verwendung eines expliziten Verfahrens zur zeitlichen Integration der Auftriebs- und Coriolisterme für Simulationen über lange Zeiträume und große Modelldomänen als ineffizient. In den nachfolgenden Abschnitten wird dargestellt, wie das Modell in dieser Arbeit erweitert wird, um schließlich effizient den Lebenszyklus atmosphärischer Schwerewellendynamik modellieren zu können.

2.4.1 Die Grundgleichungen des Modells

Das numerische Modell *PincFlow* löst die pseudo-inkompressiblen Gleichungen mit einem Finite-Volumen-Verfahren auf der f -Ebene (Rieper et al., 2013). Ihre Formulierung beinhaltet die Kontinuitätsgleichung (2.13), die horizontalen und vertikalen Implusgleichungen (2.14), die prognostische Gleichung für die massengewichtete-potentielle Temperatur der Hintergrundatmosphäre (2.20) sowie eine Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld (2.19), mithilfe derer Schallwellen aus der Dynamik herausgefiltert werden. Zusammengefasst lauten die Gleichungen in Anwesenheit einer Heizung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \circ \rho \mathbf{v}) = -c_p \bar{P} \nabla \pi - f \mathbf{e}_z \times \rho \mathbf{u} - \rho g \mathbf{e}_z, \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{P} \langle w \rangle}{\partial z} = \langle S \rangle, \quad (2.37)$$

$$\nabla \cdot [\bar{P} (\mathbf{v} - \langle w \rangle)] = S - \langle S \rangle, \quad (2.38)$$

wobei $\langle w \rangle$ über (2.28) und (2.29) berechnet wird. Wie im weiteren Verlauf noch näher erläutert wird, wird das Exnerdruckfeld dabei (wie gewöhnlich bei schallfreien bzw. inkompressiblen Modellen) nicht mit Hilfe der Zustandsgleichung (vgl. 2.6) berechnet, sondern ergibt sich implizit durch Lösen der diagnostischen Gleichung (2.38), sodass Schallwellen aus der Dynamik herausgefiltert werden⁷.

Darüber hinaus lohnt es sich an dieser Stelle die Äquivalenz der Kontinuitätsgleichung und der Advektion der potentiellen Temperatur im pseudo-inkompressiblen Modell hervorzuheben (vgl. Klein, 2009).

⁶In dieser Arbeit wird die implizite Turbulenzparametrisierung, welche in der original Implementierung von Rieper et al. (2013) verwendet wurde, aufgegeben, weshalb das Modell hier in *PincFlow* (anstelle von *PincFloIt*) umbenannt wird.

⁷Eine detaillierte Beschreibung, wie der Exnerdruck mit Hilfe der prognostizierten Felder bestimmt wird, findet sich in Abschnitt 2.4.5 (vgl. auch Gleichung 2.107).

Insbesondere gilt in Abwesenheit einer Heizung $\nabla \cdot (\overline{P}\mathbf{v}) = 0$, sodass mit (2.12) aus (2.35) die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\theta} \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\theta} \right) = 0 \quad (2.39)$$

folgt. Ferner ist zu beachten, dass das Modell in der originalen Implementierung von Rieper et al. (2013) lediglich zur Simulation adiabatischer Prozesse konzipiert wurde, d.h. ohne Heizungsterm ($S = 0$) und somit $\partial \overline{P} / \partial t = 0$. Da in dieser Arbeit jedoch als erster Anwendungstestfall die Dynamik diabatischer Prozesse, welche mit der spontanen Schwerewellenabstrahlung in Jet-Front Systemen in Verbindung gebracht werden, simuliert wird (vgl. Kapitel 4), ist das Gleichungssystem dahingehend modifiziert, dass Heizprozesse mit einbezogen werden – beispielsweise durch eine thermische Relaxation auf einen vorgegebenen Anfangszustand, welcher ein baroklin instabiles Temperaturprofil verursacht (vgl. z.B. Held und Suarez, 1994; Hien et al., 2018, und Abschnitt 2.4.4).

2.4.2 Grenzschicht und Schwammschicht

Darüber hinaus wird das Gleichungssystem durch eine Rayleigh-Dämpfung der Geschwindigkeitsfelder erweitert, welche im Bereich der Grenzschicht eine Approximation der Reibung sowie des turbulenten Transports darstellt und am Oberrand der Modelldomäne als absorbierende Schicht (sogenannte *Schwammschicht*) zur Vermeidung von Reflexionen dient. Die Dämpfungsterme der Form

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \dots = \dots - \alpha_{\mathbf{v}}(z) \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{eq}), \quad (2.40)$$

wobei $\alpha_{\mathbf{v}} = (\alpha_u, \alpha_v, \alpha_w)$ die höhenabhängigen Koeffizienten der drei Impulskomponenten bezeichnen, relaxieren die Strömung auf ein vorgegebenes, horizontales Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}_{eq} = (u_{eq}, 0, 0)^T$, welches das geostrophische Gleichgewicht erfüllt (vgl. Abschnitt 2.4.3). Für die Definition der Dämpfungsschicht am unteren Rand der Modelldomäne werden die Koeffizienten analog zum Profil von Held und Suarez (1994) bestimmt, d.h.

$$\alpha_u = \alpha_v = \frac{1}{\tau_b} \max \left(0, \frac{\sigma - \sigma_b}{1 - \sigma_b} \right) \quad \text{und} \quad \alpha_w = 0. \quad (2.41)$$

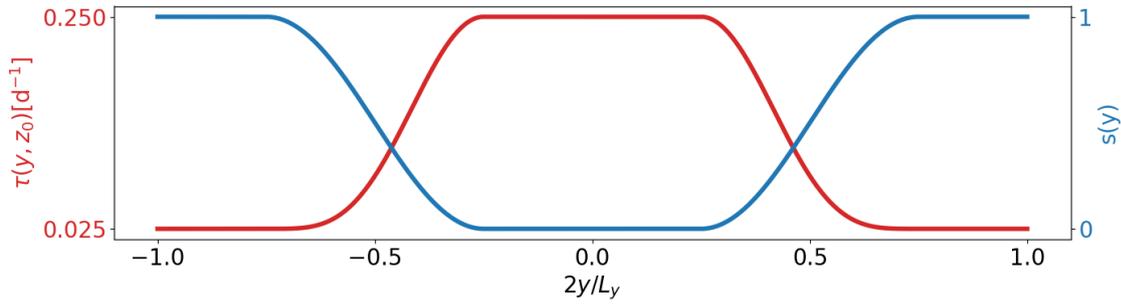


Abbildung 2.1: Gezeigt sind der meridionale Verlauf der Relaxationszeit am Boden (rot, vgl. 2.49) und die meridionale Modifikation von $\Delta\theta_y$ (blau, vgl. 2.46).

Hierbei gibt σ_b die Ausdehnung der durchmischten Grenzschicht mit einer Dämpfungszeit von τ_b an und $\sigma = \bar{\pi}^{\gamma/(\gamma-1)}$ bezeichnet den normierten Druck der Hintergrundatmosphäre, welcher am Boden den Wert 1 annimmt und mit der Höhe verschwindet. Im Unterschied dazu gilt am Oberrand der Modelldomäne (Klemp und Lilly, 1978)

$$\alpha_u = \alpha_v = \alpha_w = \frac{\alpha_{max}}{\Delta t} \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{z - z_s}{H - z_s} \right), \quad \text{falls } z_s \leq z \leq H. \quad (2.42)$$

Dabei kennzeichnet z_s die Höhe, in der die Schwammschicht beginnt, und α_{max} gibt (zusammen mit der Größe des Zeitschritts Δt) die maximale Stärke der Dämpfung am oberen Modellrand an.

2.4.3 Zeitunabhängiger Gleichgewichtszustand

Der Gleichgewichtszustand wird in dieser Arbeit, ähnlich wie in der Studie von Held und Suarez (1994), basierend auf einem vordefinierten Temperaturfeld

$$T_{eq}(y, z) = \max \left\{ T_s, \left[\theta_{ref} - \Delta\theta_y s(y) - \frac{\Delta\theta_z}{2} \frac{\gamma}{\gamma-1} \log(\pi_{eq}) \right] \pi_{eq} \right\} \quad (2.43)$$

konstruiert, wobei T_s und θ_{ref} jeweils die stratosphärische Referenztemperatur und die potentielle Temperatur am Boden in der tropischen Troposphäre bezeichnen. Weiterhin gibt $\Delta\theta_y$ die troposphärische Differenz der potentiellen Temperatur zwischen den Tropen und Polen an und $\Delta\theta_z$ quantifiziert die Schichtung in der Troposphäre. Auf diese Weise ist das Temperaturfeld in der Troposphäre baroklin, während es in größeren Höhen konstant bleibt. Aus (2.43) wird das Exnerdruck- und das potentielle Temperaturfeld durch Integration des hydrostatischen Gleichgewichts

$$\frac{\partial \pi_{eq}}{\partial z} = -\frac{g}{c_p \theta_{eq}}, \quad \text{mit} \quad \theta_{eq} = \frac{T_{eq}}{\pi_{eq}} \quad (2.44)$$

bestimmt, unterdessen $\pi_{eq}(z_0) = 1$ angenommen wird. Zu beachten ist, dass darüber hinaus in der Schwammschicht eine Reduktion von π_{eq} der Form

$$\pi_{eq} = \begin{cases} \bar{\pi} + (\pi_{eq} - \bar{\pi}) \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{z - z_s}{z_s + (H - z_s)/2 - z_s} \right), & \text{falls } z_s \leq z \leq z_s + \frac{H - z_s}{2}, \\ \bar{\pi}, & \text{falls } z > z_s + \frac{H - z_s}{2}, \end{cases} \quad (2.45)$$

und eine entsprechende Korrekur von θ_{eq} über $\partial \pi_{eq} / \partial z$ in (2.44) vorgenommen wird. Durch diese Maßnahme sollen numerische Instabilitäten am oberen Rand des Modellgebiets, welche im Zuge der Untersuchungen zu dieser Arbeit beobachtet wurden, vermieden werden. Um außerdem der Entstehung kleinskaliger, konvektiver Effekte (vor allem im Bereich der seitlichen Modellbegrenzungen) entgegenzuwirken wird, anders als in der Studie von Held und Suarez (1994), eine konstante statische Stabilität angenommen (Williams, 2006). Ferner wird eine vergleichsweise schmale barokline Zone verwendet, welche sich durch Modifikation des horizontalen potentiellen Temperaturgradienten $\Delta \theta_y$ in Abhängigkeit der Breite definiert und für die gilt (vgl. Abbildung 2.1)

$$s(y) = \begin{cases} 1, & \text{falls } y < y_s - \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{y - (y_s + \delta_{jet}/2)}{\delta_{jet}} \right), & \text{falls } y_s - \frac{\delta_{jet}}{2} \leq y < y_s + \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ 0, & \text{falls } y_s + \frac{\delta_{jet}}{2} \leq y < y_n - \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{y - (y_n - \delta_{jet}/2)}{\delta_{jet}} \right), & \text{falls } y_n - \frac{\delta_{jet}}{2} \leq y < y_n + \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ 1, & \text{falls } y \geq y_n + \frac{\delta_{jet}}{2}. \end{cases} \quad (2.46)$$

Die Längenskala δ_{jet} bezeichnet hierbei die Breite der beiden Strahlströme, deren Lage innerhalb der Modelldomäne, welche eine meridionale Ausdehnung von L_y aufweist, sodass $-L_y/2 \leq y \leq L_y/2$ gilt, jeweils über $y_{n,s} = \pm L_y/4$ angegeben ist. Schließlich wird das Geschwindigkeitfeld mit Hilfe des geostrophischen Gleichgewichts über

$$u_{eq} = -\frac{1}{f} c_p \theta_{eq} \frac{\partial \pi_{eq}}{\partial y} \quad \text{und} \quad v_{eq} = w_{eq} = 0 \quad (2.47)$$

bestimmt.

2.4.4 Heizung, Randbedingungen und Parameterwerte

Zur Erzeugung eines baroklin instabilen Temperaturprofils (Hien et al., 2018) wird die Volumenheizung durch den Newton'schen Relaxationsansatz

$$S = -\frac{\rho[\theta - \theta_{eq}(y, z)]}{\tau(y, z)}, \quad (2.48)$$

approximiert. Hierbei wird ähnlich zu Held und Suarez (1994) ein meridionaler und höhenabhängiger Verlauf der Relaxationszeit in der Form

$$\tau(y, z) = \frac{1}{\tau_a} + \left(\frac{1}{\tau_s} - \frac{1}{\tau_a} \right) \max \left(0, \frac{\sigma - \sigma_b}{1 - \sigma_b} \right) c(y) \quad (2.49)$$

gewählt, wobei (vgl. Abbildung 2.1)

$$c(y) = \begin{cases} 0, & \text{falls } y < y_s - \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ \cos^4 \left(\frac{\pi}{2} \frac{y - (y_s + \delta_{jet}/2)}{\delta_{jet}} \right), & \text{falls } y_s - \frac{\delta_{jet}}{2} \leq y < y_s + \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ 1, & \text{falls } y_s + \frac{\delta_{jet}}{2} \leq y < y_n - \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ \cos^4 \left(\frac{\pi}{2} \frac{y - (y_n - \delta_{jet}/2)}{\delta_{jet}} \right), & \text{falls } y_n - \frac{\delta_{jet}}{2} \leq y < y_n + \frac{\delta_{jet}}{2}, \\ 0, & \text{falls } y \geq y_n + \frac{\delta_{jet}}{2}. \end{cases} \quad (2.50)$$

Die Parameter τ_a und τ_s geben jeweils die maximale und minimale Relaxationszeit an, sodass im Zentrum der Modelldomäne eine schwache Relaxation herrscht, während die Relaxation an den seitlichen Rändern stärker ausgeprägt ist.

Darüber hinaus sei noch kurz auf den zwischenzeitlichen Versuch eingegangen, anstelle des oben gewählten Ansatzes (2.48), die barokline Instabilität mit Hilfe eines Relaxationsterms in der Kontinuitäts- und Impulsgleichung zu modellieren (und den Hintergrundzustand entsprechend konstant zu halten), wobei ein meridionales Relaxationsprofil ähnlich zu Gleichung (2.27) in Hien (2018) verwendet wurde. Durch diesen Ansatz konnten zwar wiederholte barokline Wellenzyklen simuliert werden, jedoch traten in einigen Fällen unphysikalische Artefakte an den Rändern auf, die eine Abhängigkeit zur gewählten Relaxationszeitskala aufwiesen und so die Dynamik der Strömung signifikant beeinflussten (nicht gezeigt). Daher wird letztendlich eine physikalisch basiertere Parametrisierung der Wärmestrahlung durch einen thermischen Relaxationsansatz gewählt.

Tabelle 2.1: Zusammenfassung der physikalischen Parameterwerte in dieser Arbeit.

Coriolisparameter f :	$1 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
Schwerebeschleunigung g :	9.81 m s^{-2}
Referenzdichte p_{ref} :	$1 \times 10^5 \text{ Pa}$
Gaskonstante trockener Luft R :	$287 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$
spezifische Wärmekapazität c_p :	$1004 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$
Isentropenexponent γ :	1.4
Unterrand der Schwammschicht z_s :	100 km
max. Dämpfungskonstante α_{max} :	1
Dämpfungszeitkonstante τ_b :	1 Tag
max. Relaxationszeit τ_a :	40 Tage
min. Relaxationszeit τ_s :	4 Tage
Dicke Grenzschicht σ_b :	0.7
zonale Länge L_x :	4200 km
meridionale Länge L_y :	16 800 km
Modellhöhe H :	150 km
Bodenhöhe z_0 :	0 km
potentielle Referenztemperatur θ_{ref} :	315 K
stratosphärische Referenztemperatur T_s :	200 K
troposphärische Temperaturdifferenz $\Delta\theta_z$:	20 K
meridionale Temperaturdifferenz ΔT_y :	30 K
Breite der Jets δ_{jet} :	4200 km
Höhe der Troposphäre z_{tr} :	11 km

Im physikalischen Raum werden, zur Vermeidung der Entwicklung möglicher Grenzschichtinstabilitäten an den seitlichen Rändern des Modellgebietes (Hien et al., 2018), periodische Randbedingungen an den horizontalen Rändern verwendet, während am oberen sowie unteren Rand der Domäne jeweils ein undurchlässiger, fester Deckel angenommen wird, sodass die Abweichungen $[\mathbf{u} - \mathbf{u}_{eq}]$ dort verschwindende Normalgeschwindigkeiten besitzen und sogenannte *free-slip* Bedingungen erfüllen. Darüber hinaus wird der vertikale Gradient der Abweichungen des Exnerdrucks von π_{eq} sowie der Dichtefluktuationen an den vertikalen Rändern vernachlässigt.

Ferner sind in Tabelle 2.1 die physikalischen Parameterwerte zusammengefasst, welche, soweit nicht anders angegeben, in dieser Arbeit verwendet werden.

2.4.5 Zeitintegrationsschema

Wahl des Zeitschrittes

Die originale Implementierung von Rieper et al. (2013) verwendet als Zeitintegrationsschema ein explizites Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung nach Williamson (1980), welches ausgehend vom Zustand des aktuellen Zeitschrittes n den Zustand einer Variablen des nächsten Zeitschrittes $\phi^{n+1} = (\rho\mathbf{v}, \rho)$ in drei Schritten⁸ berechnet:

$$\phi_*^n = \phi^n + \alpha_1 \Delta t \frac{\partial \phi^n}{\partial t}, \quad (2.51)$$

$$\phi_{**}^n = \phi_*^n + \alpha_2 \Delta t \frac{\partial \phi_*^n}{\partial t} + \beta_2 \Delta t \frac{\partial \phi^n}{\partial t}, \quad (2.52)$$

$$\phi^{n+1} = \phi_{**}^n + \alpha_3 \Delta t \frac{\partial \phi_{**}^n}{\partial t} + \beta_3 \Delta t \frac{\partial \phi_*^n}{\partial t}, \quad (2.53)$$

wobei die Parameter $\alpha_i \equiv \{1/3, 15/16, 8/15\}$ und $\beta_i \equiv \{0, -5/9, -153/128\}$ Gewichtungsfaktoren bezeichnen.

Die Länge des Zeitschrittes Δt wird dabei mit Hilfe verschiedener Stabilitätskriterien variiert und wird insbesondere zur Vermeidung von numerischen Instabilitäten aufgrund kleinskaliger Oszillationen von Schwerewellen durch eine Zeitschrittweite, die proportional zur inversen Brunt-Vaisala Frequenz (vgl. 2.64) ist, begrenzt (Rieper et al., 2013).

Ein wesentlicher Nachteil eines solchen expliziten Zeitschrittverfahrens ist jedoch, dass das Modell bei der Durchführung von Simulationen über lange Zeiträume und große Modelldomänen, beispielsweise zur Modellierung idealisierter barokliner Lebenszyklen, zunehmend teuer und zeitaufwendig wird. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit ein semi-implizites Verfahren zur Integration der Auftriebs-, Coriolis- sowie Druckgradiententerme in *PincFlow* implementiert, welches basierend auf der Methodik von Smolarkiewicz und Margolin (1997) konstruiert wurde und sich an dem zeitlichen Diskretisierungsschema, das in Benacchio und Klein (2019) sowohl für vollkompressible, pseudo-inkompressible als auch hydrostatische Gleichungssysteme entwickelt wurde, orientiert. Die Autoren zeigten anhand einer Reihe atmosphärischer Standardtestfälle, dass das semi-implizite Verfahren stabil mit großen Zeitschrittweiten rechnen kann, die einzig durch das Courant-Friedrich-Levy (CFL, Courant et al., 1928) Kriterium ν beschränkt sind:

$$\Delta t_{CFL} = \nu \min \left(\frac{\Delta x}{|u_{max}|}, \frac{\Delta y}{|v_{max}|}, \frac{\Delta z}{|w_{max}|} \right), \quad (2.54)$$

⁸Zu beachten ist, dass jeder dieser Schritte drei Teilschritten beinhaltet: einen Prädiktorschritt, das Lösen einer elliptischen Gleichung für den Druck (die aus der Divergenzbedingung folgt) und einen Korrektorschritt (vgl. Rieper et al., 2013).

wobei beispielsweise $u_{max} = \max |u|$ und Δx , Δy , und Δz jeweils die zonalen, meridionalen und vertikalen Seitenlängen einer Gitterzelle bezeichnen (vgl. Abschnitt 2.4.6). Da die Modellvariablen in *PincFlow* allerdings, anders als in dem verwendeten Modell von Benacchio und Klein (2019), auf einem versetzten Gitter angeordnet sind (vgl. Abschnitt 2.4.6 zur detaillierten Beschreibung der räumlichen numerischen Diskretisierung), wird die Implementierung des semi-impliziten Zeitschrittverfahrens in dieser Arbeit entsprechend angepasst. Darüber hinaus werden zur Berücksichtigung der zeitlichen Entwicklung des Hintergrundzustandes numerische Aspekte von O’Neill und Klein (2014) miteinbezogen. Im Folgenden wird das semi-implizite Verfahren skizziert.

Hilfsvariable

Damit das numerische Modell stabil mit großen Zeitschrittweiten rechnen kann, werden die thermodynamischen Größen zur Implementierung des semi-impliziten Zeitschrittverfahrens zunächst, ähnlich wie in der Studie von Benacchio und Klein (2019), in einen ruhenden, hydrostatischen Referenzzustand und eine Abweichung davon zerlegt. Eine analoge Vorgehensweise findet sich beispielsweise auch in den Arbeiten von Restelli und Giraldo (2009); Smolarkiewicz et al. (2014) und Smolarkiewicz et al. (2019).

Damit kann eine zusätzliche prognostische Gleichung für eine Störgröße hergeleitet werden, welche den Auftrieb repräsentiert. Zunächst wird dazu die inverse potentielle Temperatur

$$\chi = \frac{1}{\theta} = \frac{\rho}{\bar{P}} \quad (2.55)$$

definiert, sodass die rechte Seite der vertikalen Impulsgleichung (2.36) die Form

$$-\bar{P} \left(c_p \frac{\partial \pi}{\partial z} + \chi g \right) \quad (2.56)$$

annimmt. Desweiteren wird der Referenzzustand, welcher im Folgenden durch den Index $(\cdot)_r$ gekennzeichnet ist, über eine zeitunabhängige, horizontal homogene sowie hydrostatische Referenzatmosphäre, die sich in Ruhe befindet, definiert, d.h.

$$0 = -c_p \frac{d\pi_r}{dz} - \chi_r g \quad (2.57)$$

und es gilt

$$\chi' = \chi - \chi_r(z), \quad (2.58)$$

$$\pi' = \pi - \pi_r(z) \quad (2.59)$$

(vgl. Gleichungen (7) und (8) in Benacchio und Klein, 2019). Die rechte Seite der vertikalen Impulsgleichung kann damit zu

$$-\bar{P} \left(c_p \frac{\partial \pi}{\partial z} + \chi g \right) = -\bar{P} \left(c_p \frac{\partial \pi'}{\partial z} + \chi' g \right) = -c_p \bar{P} \frac{\partial \pi'}{\partial z} - \rho' g \quad (2.60)$$

umgeformt werden, wobei für die Dichtefluktuatation

$$\rho' = \bar{P} \chi' = \bar{P} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_r} \right) = \rho - \rho_r \frac{\bar{P}}{\bar{P}_r} \quad (2.61)$$

gilt, und innerhalb der horizontalen Impulsgleichungen kann unter Verwendung des horizontalen Nabla-Operators ∇_h

$$-c_p \bar{P} \nabla_h \pi = -c_p \bar{P} \nabla_h \pi' \quad (2.62)$$

geschrieben werden. Darüber hinaus liefert die Kontinuitätsgleichung mit (2.55) und der Zerlegung der inversen potentiellen Temperatur (2.58)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t} [\bar{P} (\chi_r + \chi')] + \nabla \cdot [\bar{P} \mathbf{v} (\chi_r + \chi')] \\ &= \frac{\partial \bar{P} \chi'}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{P} \mathbf{v} \chi') + \chi_r \left[\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{P} \mathbf{v}) \right] + \bar{P} w \frac{d\chi_r}{dz}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

woraus sich mit (2.16) und der Brunt-Vaisala-Frequenz der Referenzatmosphäre

$$N^2 = \frac{g}{\theta_r} \frac{d\theta_r}{dz}, \quad (2.64)$$

eine prognostische Hilfsgleichung für die Dichtefluktuatationen ergibt

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho' \mathbf{v}) = -\frac{\rho_r}{\bar{P}_r} S + w \frac{\bar{P}}{\bar{P}_r} \frac{\rho_r}{g} N^2. \quad (2.65)$$

Zu beachten ist, dass die Referenzatmosphäre im Allgemeinen nicht mit der Hintergrundatmosphäre übereinstimmt (auch wenn sie relativ ähnlich sein sollten), d.h. $(\cdot)_r \neq (\bar{\cdot})$, und daher zeitunabhängig bleibt.

Darüber hinaus wurde der Versuch unternommen, eine alternative Aufspaltung der Form $\rho = \bar{\rho}(z, t) + \rho'$ (anstelle von 2.58) vorzunehmen, woraus sich eine prognostische Hilfs-gleichung für die Dichtefluktuationen der Form

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho' \mathbf{v}) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}) - \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \quad (2.66)$$

$$= -\nabla \cdot \left(\frac{1}{\bar{\theta}} \bar{P} \mathbf{v} \right) + \frac{\partial \bar{\rho} \langle w \rangle}{\partial z} \quad (2.67)$$

$$= -\frac{1}{\bar{\theta}} \left(S - \langle S \rangle + \frac{\partial \bar{P} \langle w \rangle}{\partial z} \right) + \frac{w \bar{\rho}}{g} N^2 \quad (2.68)$$

$$= -\frac{\bar{\rho}}{\bar{P}} (S - \langle S \rangle) + (w - \langle w \rangle) \frac{\bar{\rho}}{g} N^2 \quad (2.69)$$

ergibt. Nach Implementierung dieser Methodik stellte sich jedoch heraus, dass das Modell nach einiger Zeit eine instabile Schichtung entwickelt (d.h. $\partial \bar{\theta}(z, t) / \partial z < 0$, sodass auch $N^2(z, t) < 0$) und letztendlich zu einem Abbruch des semi-impliziten Zeitschrittverfahrens führt, da (wie in Abschnitt 2.4.5 noch ersichtlich wird) $N = \sqrt{N^2}$ im Nenner der Modellgleichungen auftritt. Daher wird im Weiteren die Zerlegung der Form (2.58) verwendet, welche N^2 konstant hält und somit stabil bleibt.

Diabatische pseudo-inkompressible Modellgleichungen

Zusammengefasst lauten die diabatischen pseudo-inkompressiblen Grundgleichungen des semi-impliziten Modells *PincFlow*

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \circ \rho \mathbf{u}) = -c_p \bar{P} \nabla_h \pi' - f \mathbf{e}_z \times \rho \mathbf{u} - \alpha_{\mathbf{u}} \rho (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{eq}), \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \circ \rho w) = -c_p \bar{P} \frac{\partial \pi'}{\partial z} - \rho' g - \alpha_w \rho w, \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.72)$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho' \mathbf{v}) = -\frac{\rho_r}{P_r} S + w \frac{\bar{P}}{P_r} \frac{\rho_r}{g} N^2, \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{P} \langle w \rangle}{\partial z} = \langle S \rangle, \quad (2.74)$$

$$\nabla \cdot [\bar{P} (\mathbf{v} - \langle w \rangle \mathbf{e}_z)] = S - \langle S \rangle. \quad (2.75)$$

Es ist offensichtlich, dass die prognostische Gleichung für die Dichtefluktuationen (2.73) redundant ist, insbesondere da die Störgröße jeweils am Ende eines Zeitschrittes mit der vollen Variable synchronisiert wird, sodass Inkonsistenzen, die sich aus der Verwendung unterschiedlicher Gleichungen für die Dichte und ihre Störungen ergeben könnten,

unmittelbar vermieden werden (vgl. Benacchio und Klein, 2019). Jedoch ist zu beachten, dass die semi-implizite Behandlung des Gravitationsterms eine solche Zerlegung erfordert, da – wie in den nachfolgenden Abschnitten noch näher erkennbar wird – die Advektion der potentiellen Temperatur der Referenzatmosphäre dabei häufig separat zu deren Störgröße gehandhabt wird (vgl. auch Abschnitt 3.a.2 in Benacchio und Klein, 2019). Insbesondere wird die Advektion der potentiellen Temperatur der Referenzatmosphäre als Teil eines linearen Operators behandelt, welcher die schnellen Wellenmoden repräsentiert und als solcher eine zentrale räumliche Diskretisierung (vgl. Abschnitt und 2.4.6) sowie die Trapezregel⁹ in der Zeit beinhaltet. Eine Behandlung der Advektion des gesamten potentiellen Temperaturfeldes mittels dieser Diskretisierung würde zu unphysikalischen Oszillationen führen. Um sicherzustellen, dass solche Oszillationen unterdrückt werden, wird daher die Advektion der potentiellen Temperaturfluktuationen durch ein explizites Aufwind-Schema zweiter Ordnung diskretisiert (vgl. Abschnitt 2.4.6). Allerdings überwiegt in vielen Anwendungen der Anteil der Advektion des Referenzanteils der potentiellen Temperatur, sodass durch die zentrale Diskretisierung weiterhin unerwünschte Oszillationen auftreten können. Aus diesem Grund wird die Advektion des gesamten Feldes der potentiellen Temperatur durch ein explizites Aufwind-Schema zweiter Ordnung behandelt und bestimmt die Entwicklung über einen vollen Zeitschritt, während die prognostizierten Fluktuationen lediglich zur Konstruktion der advektiven Flüsse sowie der pseudo-inkompressiblen Divergenzbedingung innerhalb der Teilschritte des semi-impliziten Verfahrens verwendet werden (Schmid et al., 2021).

Bevor im nächsten Abschnitt das semi-implizite Zeitschrittverfahren zur Lösung des obigen Gleichungssystems (2.70) – (2.75) präsentiert wird, werden noch kurz zur besseren Übersicht, basierend auf der Notation von Smolarkiewicz et al. (2014) und Benacchio und Klein (2019), die Primärvariablen in dem Vektor

$$\Psi = (\rho \mathbf{v}, \rho, \rho') \quad (2.76)$$

gebündelt und die prognostischen Gleichungen (2.70) - (2.73) jeweils in Fluss- und Quellterme¹⁰ aufgeteilt:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \circ \Psi) = Q(\Psi, \bar{P}, \pi'). \quad (2.77)$$

⁹Eine Erläuterung der Trapezregel kann beispielsweise in Dahmen und Reusken (2006) nachgelesen werden.

¹⁰Als Quellterme $Q(\Psi, \bar{P}, \pi')$ werden hier die Terme auf der rechten Seite der Gleichungen (2.70) - (2.73) bezeichnet.

Semi-implizites Zeitschrittverfahren

Das Grundkonzept der semi-impliziten Methode besteht darin, die Advektion mit einem expliziten Verfahren zeitlich zu integrieren, während zur zeitlichen Integration der verbleibenden Quellterme implizite und explizite Euler-Verfahren verwendet werden. Mit Hilfe des Letztgenannten wird auch unter Verwendung von $\langle w \rangle$ aus (2.28) und (2.29) die zeitliche Entwicklung des Hintergrundzustandes (vgl. 2.74) berechnet, wohingegen die Fluktuationen des Exnerdrucks durch das Lösen einer elliptischen Gleichung diagnostiziert werden, sodass die Divergenzbedingung (2.75) erfüllt bleibt. Da das implementierte Verfahren sehr ähnlich zu dem semi-impliziten Schema Benacchio und Klein (2019) ist, werden im folgenden lediglich die zentralen Schritte sowie Unterschiede dazu skizziert. Eine detaillierte Erläuterung zum strukturellen Aufbau des semi-impliziten Verfahrens kann in Smolarkiewicz und Margolin (1997) und Benacchio und Klein (2019) nachgelesen werden.

Der Algorithmus zur zeitlichen Diskretisierung über einen vollen Zeitschritt $t^n \rightarrow t^{n+1}$ lautet:

- Schritt 1: Explizite Integration¹¹ der linken Seite in (2.77) über $\frac{\Delta t}{2}$

$$\Psi^\# = \Psi^n + A^{\Delta t/2} (\Psi^n, (\bar{P}\mathbf{v})^n), \quad (2.78)$$

wobei der Operator A ein nicht-lineares Aufwind-Schema zur linearen Advektion von Ψ/\bar{P} ¹² mit vorgegebenem Trägerfluss $\bar{P}\mathbf{v}$ bezeichnet (Benacchio und Klein, 2019), welches in Abschnitt 2.4.6 näher erläutert wird.

- Schritt 2: Explizites Euler-Verfahren zur Integration des Hintergrundzustandes (vgl. O'Neill und Klein (2014)) über $\frac{\Delta t}{2}$

$$\bar{P}^{n+1/2} = \bar{P}^n - \frac{\Delta t}{2} \left[\left(\frac{(\bar{P}\langle w \rangle)_{k+1/2}^n - (\bar{P}\langle w \rangle)_{k-1/2}^n}{\Delta z} \right) - \langle S \rangle^n \right] \quad (2.79)$$

mit

$$\left(\frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} \right)^n = \frac{\sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} (\langle S \rangle / \bar{P})_k^n}{\sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} (1/\gamma \bar{P})_k^n}, \quad (2.80)$$

¹¹Als explizites Integrationsschema wird in dieser Arbeit das Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung nach Williamson (1980) (vgl. 2.51 - 2.53) verwendet.

¹²Zu beachten ist, dass hier die inverse potentiellen Temperatur advehiert wird und nicht die Dichte, welche eine Erhaltungsgröße ist.

$$\langle w \rangle_{k+1/2}^n = \Delta z \left\{ \sum_{k'=k_{min}}^k \left[\left(\frac{\langle S \rangle}{P} \right)_{k'}^n - \left(\frac{1}{\gamma \bar{p}} \right)_{k'}^n \left(\frac{\partial \bar{p}^{top}}{\partial t} \right)_{k'}^n \right] \right\}, \quad (2.81)$$

und implizite Integration der rechten Seiten in (2.77) über $\frac{\Delta t}{2}$

$$\Psi^{n+1/2} = \Psi^\# + \frac{\Delta t}{2} Q(\Psi^{n+1/2}, \bar{P}^{n+1/2}, \pi^{n+1/2}). \quad (2.82)$$

Zu beachten ist, dass die Dichte aufgrund des Prinzips der Massenerhaltung in (2.82) konstant gehalten wird (vgl. 2.72 und 2.77). Darüber hinaus führt die Berücksichtigung der Heizung dazu, dass der horizontal gemittelte Vertikalwind $\langle w \rangle$ (und folglich auch die Heizrate $\langle S \rangle$) nicht verschwindet und sich die Hintergrundatmosphäre zeitlich entwickelt, welche über (2.79) berücksichtigt wird und analog zu O'Neill und Klein (2014) unter Anwendung eines expliziten Euler-Verfahrens berechnet wird. Dabei kennzeichnen die Indizes $(\cdot)_{k\pm 1/2}$ jeweils die vertikale Position der unteren und oberen Ränder einer skalaren Gitterzelle und $z_{k_{min}} = \Delta z/2$ bzw. $z_{k_{max}} = H - \Delta z/2$ (vgl. die räumliche numerische Diskretisierung in Abschnitt 2.4.6). Des Weiteren beinhaltet die implizite Zeitintegration der linearen Terme auf der rechten Seiten in (2.82) drei Teilschritte, welche im nachfolgenden Abschnitt 2.4.5 noch detaillierter dargelegt werden: Unter Verwendung der Exnerdruckfluktuationen aus dem vorherigen Zeitschritt werden zunächst in einem Prädiktorschritt die zeitliche Entwicklung der Winde sowie der Dichtefluktuationen (oder genauer gesagt des Auftriebsfeldes) bestimmt. Im Anschluss daran wird eine elliptische Gleichung gelöst, woraus die Fluktuationen des Exnerdrucks $\pi^{n+1/2}$ diagnostiziert werden, welche schließlich in einem Korrekurschritt zur Aktualisierung der Felder $\Psi^{n+1/2}$ verwendet werden. Dies gewährleistet, dass die Strömung auch weiterhin die Divergenzbedingung (2.75) erfüllt.

- Schritt 3: Explizites Euler-Verfahren zur Integration der rechten Seiten in (2.77) über $\frac{\Delta t}{2}$

$$\Psi^* = \Psi^n + \frac{\Delta t}{2} Q(\Psi^n, \bar{P}^n, \pi^n). \quad (2.83)$$

- Schritt 4: Explizite Integration der linken Seite in (2.77) über Δt (analog zu 2.78)

$$\Psi^{**} = \Psi^* + A^{\Delta t} \left(\Psi^*, (\bar{P}\mathbf{v})^{n+1/2} \right). \quad (2.84)$$

- Schritt 5: Explizites Euler-Verfahren zur Integration des Hintergrundzustandes über Δt (analog zu (2.79) mit (2.80) und (2.81))

$$\bar{P}^{n+1} = \bar{P}^n - \Delta t \left[\left(\frac{(\bar{P}\langle w \rangle)_{k+1/2}^{n+1/2} - (\bar{P}\langle w \rangle)_{k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} \right) - \langle S \rangle^{n+1/2} \right], \quad (2.85)$$

und implizite Integration der rechten Seiten in (2.77) über $\frac{\Delta t}{2}$ (analog zu 2.82)

$$\Psi^{n+1} = \Psi^{**} + \frac{\Delta t}{2} Q(\Psi^{n+1}, \bar{P}^{n+1}, \pi^{n+1}). \quad (2.86)$$

Zu beachten ist, dass im Rahmen des expliziten Verfahrens in (2.83) im Gegensatz zu dem impliziten Euler-Verfahren in (2.82) und (2.86) die diagnostische Anpassung der Fluktuationen des Exnerdrucks sowie der Korrekturschritt vernachlässigt wird.

- Schritt 6 bzw. 0: Synchronisation der Dichtefluktuation

$$\rho^{n+1} = \rho^{n+1} - \rho_r \frac{\bar{P}^{n+1}}{\bar{P}_r}. \quad (2.87)$$

Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass die obige Kombination aus einem expliziten Euler-Verfahren (2.83) zu Beginn und einem impliziten Euler-Verfahren (2.86) am Ende der Trapezregel¹³ entspricht, welche formal eine Genauigkeit zweiter Ordnung besitzt und symplektisch¹⁴ ist. Durch die letzt genannte Eigenschaft wird sichergestellt, dass die schnellsten Oszillationen bezüglich der betrachteten Zeitskalen, die durch die linearen Terme der Bewegungsgleichungen (ohne Rayleigh-Dämpfung) auftreten, berücksichtigt werden. Die Verschachtelung der beiden Schritte (2.83 und 2.86) mit dem Advektionschema (2.84) ist dabei nichts anderes als die Anwendung der Trapezregel entlang einer Lagrange-Lösungstrajektorie (vgl. Smolarkiewicz und Margolin, 1997; Benacchio und Klein, 2019, für eine detailliertere Erläuterung).

¹³Eine Erläuterung der Trapezregel kann beispielsweise in Dahmen und Reusken (2006) nachgelesen werden.

¹⁴Eine Definition zur Symplektizität sowie nähere Erläuterungen über symplektische Integratoren findet sich beispielsweise in Leimkuhler und Reich (2004) und Hairer et al. (2006).

Darüber hinaus gibt es einen weiteren zentralen Punkt, welcher bei der Verwendung der Trapezregel zur numerischen Lösung schallfreier Gleichungssysteme mit einbezogen werden muss. In Folge der Trapezregel werden bei der zeitlichen Integration der Impulsgleichung innerhalb des expliziten Euler-Schritts (2.83) Exnerdruckfluktuationen berücksichtigt, welche vom vorherigen Zeitschritt abhängen, d.h. π^n . Wenn diese nun jedoch um das Inkrement $\delta\pi$ vom exakten Druckfeld zum Zeitpunkt t^n abweichen, muss, um weiterhin zu gewährleisten, dass die Strömung die Divergenzbedingung (2.75) erfüllt, der daraus implizierte Divergenzfehler im Schritt (2.86) korrigiert werden. Die Lösung zum Zeitpunkt t^{n+1} weicht infolgedessen um $-\delta\pi$ von der exakten Lösung ab und führt in den nachfolgenden Zeitschritten zu einer ständige Oszillation von $\pm\delta\pi$ um die korrekte Lösung. Zur Vermeidung dieses Sachverhalts gibt es verschiedene Ansätze: Zum einen kann eine Mittelung der Felder der Exnerdruckfluktuationen zwischen zwei Zeitschritten (t^n und t^{n+1}) vorgenommen werden, um zur Zeit $t^{n+1/2}$ ein Druckfeld zu erhalten, welches frei von Oszillationen ist. Zum anderen kann $\pi^{n+1/2}$ aus (2.82) anstelle von π' in Schritt (2.83) verwendet werden, wie in der Studie von Chew et al. (2021) gezeigt. Eine dritte Möglichkeit, welche in dieser Arbeit verwendet wird, stellt die Behandlung des Druckfeldes im Rahmen des Korrekturschritts über einen vollen Zeitschritt in (2.86) anstatt über einen halben Zeitschritt dar und wird im folgenden Abschnitt 2.4.5 (vgl. auch weitere Ausführungen unter Gleichung 2.108) näher erläutert. Diese Methodik führt zwar dazu, dass die numerische Genauigkeitsordnung der Exnerdruckfluktuationen formal reduziert wird, allerdings bleibt die Genauigkeit zweiter Ordnung der restlichen Felder erhalten (vgl. die Ergebnisse der Modellvalidierung in Kapitel 3).

Implizite Integration der rechten Seiten unter Berücksichtigung der Divergenzfreiheit

Die zeitliche Integration der rechten Seiten in (2.77) wird jeweils unter Anwendung eines expliziten Euler-Verfahrens (vgl. 2.83) sowie zwei impliziten Euler-Verfahren (vgl. 2.82 und 2.86) realisiert. Wie bereits im vorherigen Abschnitt kurz erläutert, setzt sich das implizite Lösungsverfahren dabei aus einem Prädiktorschritt, einer diagnostischen Aktualisierung der Exnerdruckfluktuationen und schließlich einem Korrektorschritt, welcher sicher stellt, dass die Divergenzbedingung weiterhin erfüllt bleibt, zusammen. Im Folgenden werden die grundlegenden Aspekte dieser Teilschritte in (2.82) und (2.86) näher ausgeführt.

Es wird zunächst, unter Vernachlässigung der Flussterme, die Variable ρ bei der impliziten Integration von (2.70), (2.71) und (2.73) konstant gehalten, was daraus resultiert, dass aufgrund der Massenerhaltung die rechte Seite der Kontinuitätsgleichung (2.72)

gleich Null gesetzt ist (Benacchio und Klein, 2019). Außerdem werden die Variablen \bar{P} und S als gegeben angenommen (diese werden in (2.79) bzw. (2.85) integriert und dann in (2.82) bzw. (2.86) festgehalten). Zur besseren Verständlichkeit werden diese Variablen im Folgenden durch den hochgestellte Index $(\cdot)^\circ$ gekennzeichnet (analog wie in Abschnitt 3.c.1 in Benacchio und Klein, 2019) und die prognostischen Gleichungen (2.70), (2.71) und (2.73) in der Form

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -c_p \frac{1}{\chi^\circ} \nabla \pi' - f \mathbf{e}_z \times \mathbf{u} + b' \mathbf{e}_z - \alpha_{\mathbf{v}} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{eq}) \quad (2.88)$$

$$\frac{\partial b'}{\partial t} = \frac{\chi_r g}{\rho^\circ} S^\circ - w \frac{\chi_r}{\chi^\circ} N^2 \quad (2.89)$$

zusammengefasst, wobei $b = b' = -g\rho'/\rho^\circ$ den Auftrieb bezeichnet.

Als nächstes werden die Gleichungen unter Anwendung der Methodik aus den Arbeiten von Smolarkiewicz et al. (2001) und Prusa et al. (2008) umgeformt, da durch die verwendete räumliche numerische Diskretisierung der rechten Seiten in (2.88) und (2.89) auf dem versetzten Modellgitter (vgl. Abschnitt 2.4.6 für Details) das geostrophische und hydrostatische Gleichgewicht nicht ausreichend repräsentiert werden kann (siehe Anhang A für Details). Dazu wird ein zeitunabhängiger Gleichgewichtszustand mit einem rein horizontalen Windfeld ($w_{eq} = 0$) definiert, für den ein Gleichgewicht zwischen Druckgradientkraft, Corioliskraft und Auftriebskraft herrscht:

$$0 = -c_p \frac{1}{\chi_{eq}} \nabla \pi'_{eq} - f \mathbf{e}_z \times \mathbf{u}_{eq} + b'_{eq} \mathbf{e}_z, \quad (2.90)$$

$$0 = \nabla \cdot (\bar{P}_{eq} \mathbf{v}_{eq}). \quad (2.91)$$

Die Subtraktion der Bedingung (2.90) von (2.88) führt auf die modifizierte Impulsgleichung

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial t} \equiv \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -c_p \frac{1}{\chi^\circ} \nabla \hat{\pi}' - c_p \widehat{\left(\frac{1}{\chi^\circ} \right)} \nabla \pi'_{eq} - f \mathbf{e}_z \times \hat{\mathbf{u}} + \hat{b}' \mathbf{e}_z - \alpha_{\mathbf{v}} \hat{\mathbf{v}}, \quad (2.92)$$

wobei $\hat{\psi} = \psi - \psi_{eq}$ die Abweichung der Felder Ψ vom anfänglichen Gleichgewichtszustand angibt.

Die implizite Zeitdiskretisierung zur Integration der Gleichungen (2.89) und (2.92) lautet somit

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n - \Delta t \left[c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \hat{\pi}'^{,n+1}}{\partial x} + c_p \left(\frac{1}{\chi^\circ} \right) \frac{\partial \pi'_{eq}{}^{,n+1}}{\partial x} - f \hat{v}^{n+1} + \alpha_u \hat{u}^{n+1} \right], \quad (2.93)$$

$$\hat{v}^{n+1} = \hat{v}^n - \Delta t \left[c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \hat{\pi}'^{,n+1}}{\partial y} + c_p \left(\frac{1}{\chi^\circ} \right) \frac{\partial \pi'_{eq}{}^{,n+1}}{\partial y} + f \hat{u}^{n+1} + \alpha_v \hat{v}^{n+1} \right], \quad (2.94)$$

$$\hat{w}^{n+1} = \hat{w}^n - \Delta t \left[c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \hat{\pi}'^{,n+1}}{\partial z} + c_p \left(\frac{1}{\chi^\circ} \right) \frac{\partial \pi'_{eq}{}^{,n+1}}{\partial z} - \hat{b}'^{,n+1} + \alpha_w \hat{w}^{n+1} \right], \quad (2.95)$$

$$\hat{b}'^{,n+1} = \hat{b}'^{,n} + \Delta t \left[\frac{\chi_r g}{\rho^\circ} S^\circ - w^{n+1} \frac{\chi_r}{\chi^\circ} N^2 \right]. \quad (2.96)$$

Hierbei müssen die Fluktuationen des Exnerdrucks so bestimmt werden, dass die Winde weiterhin die Divergenzbedingung (2.75) erfüllen. Aus diesem Grund wird $\pi'^{,n+1}$ in die Exnerdruckfluktuationen aus dem vorherigen Zeitschritt und eine inkrementelle Abweichung davon aufgespalten

$$\pi'^{,n+1} = \pi'^{,n} + \delta \pi'^{,n+1}, \quad (2.97)$$

sodass sich aus (2.93) - (2.96)

$$u^{n+1} = u^{*,n+1} - \frac{c_p \frac{1}{\chi^\circ} \left[(1 + \alpha_v \Delta t) \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial x} + f \Delta t \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial y} \right]}{(1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2}, \quad (2.98)$$

$$v^{n+1} = v^{*,n+1} - \frac{c_p \frac{1}{\chi^\circ} \left[(1 + \alpha_u \Delta t) \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial y} - f \Delta t \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial x} \right]}{(1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2}, \quad (2.99)$$

$$w^{n+1} = w^{*,n+1} - \frac{c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial z}}{1 + \alpha_w \Delta t + \frac{\chi_r}{\chi^\circ} (N \Delta t)^2}, \quad (2.100)$$

$$b'^{,n+1} = b'^{*,n+1} + \frac{\frac{\chi_r}{\chi^\circ} N^2 \Delta t c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial z}}{1 + \alpha_w \Delta t + \frac{\chi_r}{\chi^\circ} (N \Delta t)^2}, \quad (2.101)$$

zusammen mit $\delta \phi' = \Delta t \delta \pi'$ und

$$u^{*,n+1} - u_{eq} = \frac{(1 + \alpha_v \Delta t) \left[\hat{u}^n - \Delta t c_p \hat{X} \right] + f \Delta t \left[\hat{v}^n - \Delta t c_p \hat{Y} \right]}{(1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2}, \quad (2.102)$$

$$v^{*,n+1} - v_{eq} = \frac{(1 + \alpha_u \Delta t) \left[\hat{v}^n - \Delta t c_p \hat{Y} \right] - f \Delta t \left[\hat{u}^n - \Delta t c_p \hat{X} \right]}{(1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2}, \quad (2.103)$$

$$w^{*,n+1} - w_{eq} = \frac{\left[w^n - \Delta t c_p \hat{Z} \right] + \Delta t \left[\hat{b}'^{,n} + \Delta t \frac{\chi_r g}{\rho^\circ} S^\circ \right]}{1 + \alpha_w \Delta t + \frac{\chi_r}{\chi^\circ} (N \Delta t)^2}, \quad (2.104)$$

$$b'^{*,n+1} - b_{eq} = \frac{-\frac{\chi_r}{\chi^\circ} N^2 \Delta t \left[w^n - \Delta t c_p \hat{Z} \right] + (1 + \alpha_w \Delta t) \left(\hat{b}'^{,n} + \Delta t \frac{\chi_r g}{\rho^\circ} S^\circ \right)}{1 + \alpha_w \Delta t + \frac{\chi_r}{\chi^\circ} (N \Delta t)^2} \quad (2.105)$$

sowie

$$\hat{X}_i = \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \hat{\pi}'^{,n}}{\partial x_i} + \left(\frac{1}{\chi^\circ} \right) \frac{\partial \pi'_{eq}}{\partial x_i}, \quad (2.106)$$

wobei x_i jeweils eine der drei räumlichen Koordinaten kennzeichnet, ergibt. Die Gleichungen (2.102) - (2.105) charakterisieren hierbei die zeitliche Entwicklung der Wind- und Auftriebsfelder durch den Prädiktorschritt, welcher die Fluktuation des Exnerdrucks aus dem vorherigen Zeitschritt berücksichtigt. Zu beachten ist, dass durch die Subtraktion eines vordefinierten Gleichgewichtszustandes von der rechten Seite der Impulsgleichung (vgl. 2.88 und 2.90) zumindest sichergestellt werden kann, dass innerhalb des Prädiktorschrittes (2.102) - (2.105) diese vorgegebene Gleichgewichtsbeziehung in Abwesenheit einer Heizung (d.h. $S = \langle S \rangle = 0$ und $\langle w \rangle = 0$) auch nach Anwendung der räumlichen Diskretisierung erfüllt bleibt. In dieser Arbeit wird der in Abschnitt 2.4.3 beschriebene Gleichgewichtszustand verwendet.

Weiterhin werden im Korrekturschritt (2.98) - (2.101) die aktualisierten Exnerdruckfluktuationen verwendet. Sie werden durch das Lösen einer elliptischen Gleichung diagnostiziert, mit Hilfe derer weiterhin sichergestellt wird, dass die Strömung die Divergenzbedingung erfüllt. Die diagnostische Gleichung ergibt sich durch Einsetzen von (2.98) - (2.100) in (2.75)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{c_p \frac{\bar{P}^{\circ 2}}{\rho^\circ} \left[(1 + \alpha_v \Delta t) \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial x} + f \Delta t \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial y} \right]}{(1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2} \right\} \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{c_p \frac{\bar{P}^{\circ 2}}{\rho^\circ} \left[(1 + \alpha_u \Delta t) \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial y} - f \Delta t \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial x} \right]}{(1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2} \right\} \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{c_p \frac{\bar{P}^{\circ 2}}{\rho^\circ} \frac{\partial \delta \phi'^{,n+1}}{\partial z}}{(1 + \alpha_w \Delta t) + \frac{\chi_r}{\chi^\circ} (N \Delta t)^2} \right\} \\ & = \nabla \cdot \left[\bar{P}^\circ (\mathbf{v}^{*,n+1} - \langle w \rangle^\circ \mathbf{e}_z) \right] - (S^\circ - \langle S \rangle^\circ), \end{aligned} \quad (2.107)$$

und wird über ein präkonditioniertes, stabilisiertes Bikonjugierte-Gradienten-Verfahren (engl.: *Bi-Conjugate Gradient STABilised – BiCGSTAB*, Van der Vorst (1992)) gelöst. Das iterative Verfahren stoppt, wenn entweder eine vorgegebene, maximale Anzahl an Iterationen erreicht ist oder der mittlere quadratische Fehler zwischen den beiden Seiten in Gleichung (2.107) den Wert

$$\epsilon_a = \epsilon_p \left\langle \left[\frac{\partial}{\partial x} (\bar{P}^\circ u^{*,n+1}) \right]^2 + \left[\frac{\partial}{\partial y} (\bar{P}^\circ v^{*,n+1}) \right]^2 + \left\{ \frac{\partial}{\partial z} [\bar{P}^\circ (w^{*,n+1} - \langle w \rangle^\circ)] \right\}^2 + (S^\circ - \langle S \rangle^\circ)^2 \right\rangle^{1/2} \quad (2.108)$$

unterschreitet, wobei ϵ_p eine relative Toleranzgrenze bezeichnet¹⁵. Zu beachten ist, dass die großen, äußeren spitzen Klammern hierbei ein Volumenmittel angeben (und kein horizontales Mittel). Analog zu Benacchio und Klein (2019), wird in dieser Arbeit, solange nicht anders angegeben, für das BiCGSTAB-Verfahren eine relative Toleranzgrenze von $\epsilon_p = 10^{-8}$ gewählt (vgl. 2.108). Die Lösung von (2.107) wird anschließend zur Berechnung von (2.98) - (2.101) verwendet.

Abschließend sei noch kurz auf die bereits in Abschnitt 2.4.5 erwähnte unterschiedliche Behandlung der Druckkorrektur innerhalb der impliziten Euler-Schritte (2.82) und (2.86) eingegangen. Dabei wird in (2.82) der Korrekturschritt in Übereinstimmung mit dem Prädiktorschritt über einen halben Zeitschritt berechnet, d.h. $\delta\phi' = (\Delta t/2)\delta\pi'$, so dass $\pi^{m+1/2} = \pi^m + 2\delta\phi'/\Delta t$. Dies unterscheidet sich jedoch von dem Korrekturschritt in (2.86), innerhalb dessen die Druckkorrektur über einen vollen Zeitschritt berechnet wird, d.h. $\delta\phi' = \Delta t\delta\pi'$ und somit $\pi^{m+1} = \pi^m + \delta\phi'/\Delta t$, da die vorherige explizite Integration in (2.83) ohne Korrekturschritt erfolgt.

2.4.6 Räumliche numerische Diskretisierung

Zur räumlichen Diskretisierung der Gleichungen verwendet *PincFlow* eine Finite-Volumen Approximation. Dabei wird die dreidimensionale Modelldomäne in gleichförmige Gitterzellen mit dem Gittervolumen $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ aufgeteilt, welche in zonaler, meridionaler und vertikaler Richtung jeweils durch die Indizes $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$, und $k = 1, \dots, N_z$ gekennzeichnet sind. Eine auf einem Gitterpunkt (i, j, k) definierte Zustandsgröße ergibt sich demnach durch Mittelung über die zugehörige Gitterzelle, d.h. es gilt beispielsweise

¹⁵Weiterführende technische Aspekte zum Lösen der elliptischen Gleichung 2.107 sind in Anhang B skizziert.

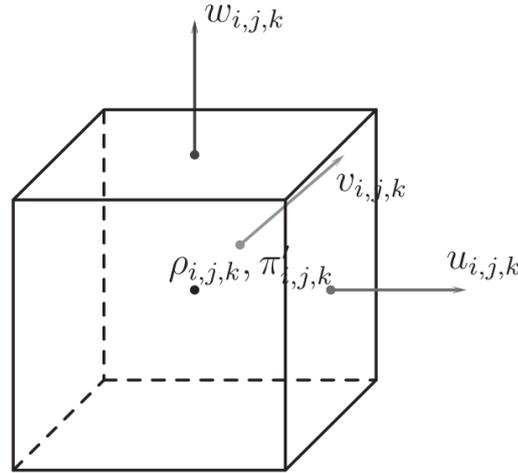


Abbildung 2.2: Eine Gitterzelle von *PincFlow* inklusive versetzter Anordnung der Felder (entsprechend eines C-Gitters). Aus Rieper et al. (2013).

$$\rho_{i,j,k}^n \approx \frac{1}{V} \int_V \rho(x, y, z, t^n) dV. \quad (2.109)$$

Zur Erhöhung der numerischen Stabilität werden die Modellvariablen auf einem versetzten C-Gitter (Arakawa und Lamb, 1977) angeordnet (siehe Abbildung 2.2). Dabei werden die skalaren Felder in der Mitte einer Gitterzelle platziert (z.B. $\rho_{i,j,k}^n$), während die horizontalen und vertikalen Geschwindigkeiten auf den Rändern einer sogenannten skalaren Gitterzelle festgelegt werden (d.h. $u_{i+1/2,j,k}^n$, $v_{i,j+1/2,k}^n$, $w_{i,j,k+1/2}^n$). Somit sind die Gitterzellen der Geschwindigkeitskomponenten jeweils um eine halbe Zelle in die entsprechende Richtung versetzt.

Rekonstruktion, Flussdivergenzen und räumliche Diskretisierung der rechten Seiten

Zur Berechnung der advektiven Flüsse der jeweiligen Gitterzelle (vgl. die linken Seite von (2.77)) wurde in der originalen Implementierung von Rieper et al. (2013) die von Hickel et al. (2006) vorgestellte Adaptive Lokale Entfaltung (engl.: *Adaptive Local Deconvolution Method*, *ALDM*) verwendet, welche in unterschiedlichen Studien anhand von Simulationen verschiedener geophysikalischer Probleme (siehe z.B. Hickel et al., 2006; Remmler und Hickel, 2012, 2013; Rieper et al., 2013) verifiziert wurde. Allerdings beobachteten Remmler et al. (2015) durch Vergleiche mit direkten numerischen Simulationen

in einigen Testfällen übermäßig stark ausgeprägte, dissipative Effekte von ALDM.

Daher wird in dieser Arbeit zur Diskretisierung der Flussdivergenzen ein monotones Aufwind-Schema zweiter Ordnung (engl.: *Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws*, MUSCL, VanLeer, 2006) genutzt. Analog zu Benacchio et al. (2014) und Benacchio und Klein (2019), wird dabei zur Diskretisierung der Flussdivergenzen $\bar{P}\mathbf{v}$ als Trägerfluss angenommen, sodass innerhalb der linken Seiten in (2.70) - (2.73)

$$(\rho\mathbf{v}, \rho'\mathbf{v}) = (\bar{P}\mathbf{v}\chi, \bar{P}\mathbf{v}\chi'), \quad (2.110)$$

$$(\mathbf{v} \circ \rho\mathbf{v}) = (\bar{P}\mathbf{v} \circ \chi\mathbf{v}) \quad (2.111)$$

gilt (vgl. z.B. auch Klein, 2009; Smolarkiewicz et al., 2014, und darin angegebene Referenzen). Die Integration über eine Schrittweite Δt der Flussterme der Kontinuitätsgleichung¹⁶ (vgl. (2.78) und (2.84)) innerhalb eines Teilschritts des verwendeten Runge-Kutta Verfahrens (vgl. Abschnitt 2.4.5 und 2.4.5) kann somit ausgedrückt werden als

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i,j,k}^{n+1} - \rho_{i,j,k}^n}{\Delta t} = & -\frac{1}{\Delta x} \left(A_{i+1/2,j,k}^{\rho,x} - A_{i-1/2,j,k}^{\rho,x} \right) \\ & -\frac{1}{\Delta y} \left(A_{i,j+1/2,k}^{\rho,y} - A_{i,j-1/2,k}^{\rho,y} \right) \\ & -\frac{1}{\Delta z} \left(A_{i,j,k+1/2}^{\rho,z} - A_{i,j,k-1/2}^{\rho,z} \right), \end{aligned} \quad (2.112)$$

wobei die advektiven Dichteflüsse durch ein Aufwind-Schema, z.B. in zonaler Richtung, zusammen mit

$$\sigma_{u_{i+1/2,j,k}} = \text{sgn} \left(\bar{P}_k u_{i+1/2,j,k}^n \right) \quad (2.113)$$

über

$$A_{i+1/2,j,k}^{\rho,x} = (\bar{P}_k u_{i+1/2,j,k}^n)^n \left[\sigma_{u_{i+1/2,j,k}} \tilde{\chi}_{i,j,k}^R + (1 - \sigma_{u_{i+1/2,j,k}}) \tilde{\chi}_{i+1,j,k}^L \right] \quad (2.114)$$

berechnet werden. Für die rekonstruierten Größen der inversen potentiellen Temperatur an den Rändern einer skalaren Gitterzelle gilt dabei für den Fall, dass $\chi_{i,j,k} = \chi_{i-1,j,k}$ oder $\chi_{i,j,k} = \chi_{i+1,j,k}$ ist

$$\tilde{\chi}_{i,j,k}^L = \tilde{\chi}_{i,j,k}^R = \chi_{i,j,k}^n \quad (2.115)$$

und anderenfalls

¹⁶Die Diskretisierung der Flussdivergenz der Dichtefluktuationen wird analog berechnet.

$$\tilde{\chi}_{i,j,k}^L = \chi_{i,j,k}^n - \frac{1}{2}\eta\left(\frac{\chi_{i+1,j,k}^n - \chi_{i,j,k}^n}{\chi_{i,j,k}^n - \chi_{i-1,j,k}^n}\right)(\chi_{i,j,k}^n - \chi_{i-1,j,k}^n), \quad (2.116)$$

$$\tilde{\chi}_{i,j,k}^R = \chi_{i,j,k}^n + \frac{1}{2}\eta\left(\frac{\chi_{i,j,k}^n - \chi_{i-1,j,k}^n}{\chi_{i+1,j,k}^n - \chi_{i,j,k}^n}\right)(\chi_{i+1,j,k}^n - \chi_{i,j,k}^n), \quad (2.117)$$

wobei η eine Limitierungsfunktion bezeichnet. Diese wird in numerischen Modellen häufig zur Vermeidung von unphysikalischen Oszillationen, welche durch Unstetigkeiten oder scharfe Gradienten in der Lösung verursacht werden, verwendet (Klein, 2009). Zu beachten ist jedoch, dass Limiterfunktionen lokal die Genauigkeit und das Konvergenzverhalten der numerischen Methode beeinträchtigen können (Kadioglu et al., 2008; Klein, 2009) und, wie in der Studie von Klein (2009) anhand eines Testfalls brechender Bergwellen erläutert, einen nicht zu vernachlässigenden Freiheitsgrad innerhalb eines numerischen Atmosphärenmodells darstellen. In dieser Arbeit wird ein Total-Variation-Diminishing Limiter (Kemm, 2010) der Form

$$\eta(\xi) = \max\{0, \min[2\xi, (2 + \xi)/3, 2]\} \quad (2.118)$$

verwendet. Eine Untersuchung über dessen Einfluss auf die Simulationsergebnisse ist in Kapitel 3 zu finden.

Die Diskretisierung der advektiven Impulsflüsse wird in ähnlicher Weise berechnet. Dazu werden zunächst die horizontalen und vertikalen Impulse sowie das zugehörige Produkt aus dem jeweiligen Geschwindigkeitsfeld und der inversen potentiellen Temperatur durch lineare Interpolation der Skalarfelder auf die Ränder einer skalaren Gitterzelle rekonstruiert. Beispielsweise ergibt sich für die zonalen Größen

$$(\rho u)_{i+1/2,j,k}^n = \rho_{i+1/2,j,k}^n u_{i+1/2,j,k}^n, \quad \rho_{i+1/2,j,k}^n = \frac{1}{2}(\rho_{i,j,k}^n + \rho_{i+1,j,k}^n), \quad (2.119)$$

$$(\chi u)_{i+1/2,j,k}^n = \chi_{i+1/2,j,k}^n u_{i+1/2,j,k}^n, \quad \chi_{i+1/2,j,k}^n = \frac{1}{2}(\chi_{i,j,k}^n + \chi_{i+1,j,k}^n) \quad (2.120)$$

und die advektiven Geschwindigkeiten im Zentrum einer Gitterzelle, z.B. in zentraler Richtung, errechnen sich analog über

$$u_{i,j,k}^n = \frac{1}{2}(u_{i+1/2,j,k}^n + u_{i-1/2,j,k}^n). \quad (2.121)$$

Ähnlich zu (2.112) lautet damit die Diskretisierung der Impulsflussdivergenz, z.B. in zonaler Richtung

$$\begin{aligned} \frac{(\rho u)_{i+1/2,j,k}^{n+1} - (\rho u)_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta t} = & -\frac{1}{\Delta x} \left(A_{i+1,j,k}^{\rho u,x} - A_{i,j,k}^{\rho u,x} \right) \\ & -\frac{1}{\Delta y} \left(A_{i+1/2,j+1/2,k}^{\rho u,y} - A_{i+1/2,j-1/2,k}^{\rho u,y} \right) \\ & -\frac{1}{\Delta z} \left(A_{i+1/2,j,k+1/2}^{\rho u,z} - A_{i+1/2,j,k-1/2}^{\rho u,z} \right), \end{aligned} \quad (2.122)$$

wobei der advektive zonale Impulsfluss über

$$A_{i,j,k}^{\rho u,x} = (\bar{P}_k u_{i,j,k})^n \left[\sigma_{u_i} (\widetilde{\chi u})_{i-1/2,j,k}^R + (1 - \sigma_{u_i}) (\widetilde{\chi u})_{i+1/2,j,k}^L \right] \quad (2.123)$$

berechnet wird und die rekonstruierten Felder $\widetilde{\chi u}$ sich jeweils durch Anwendung von (2.115) - (2.117) auf χu (anstatt χ) sowie einer Verschiebung des zonalen Index um 1/2 ergeben.

Weiterhin werden zur Berechnung der räumlichen Ableitungen auf den rechten Seiten in (2.88) - (2.89) zentrale Differenzen zweiter Ordnung verwendet. Zu beachten ist, dass durch das verwendete C-Gitter die Fluktuation des Exnerdrucks im Zentrum einer Gitterzelle definiert ist. Beispielsweise lautet die räumliche Diskretisierung von (2.102)

$$\begin{aligned} u_{i+1/2,j,k}^{n+1} = & u_{i+1/2,j,k}^{*,n+1} \\ & - \frac{\Delta t c_p \left(\frac{1}{\chi^{\circ}} \right)_k \left[(1 + \alpha_v \Delta t) \frac{\partial \delta \pi'^{n+1}}{\partial x} + f \Delta t \frac{\partial \delta \pi'^{n+1}}{\partial y} \right]_{i+1/2,j,k}}{(1 + \alpha_{u,k} \Delta t)(1 + \alpha_{v,k} \Delta t) + (f \Delta t)^2}, \end{aligned} \quad (2.124)$$

wobei die räumlichen Approximationen der zonalen Ableitung der Exnerdruckfluktuation durch

$$\left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial x} \right)_{i+1/2,j,k} = \frac{\delta \pi'_{i+1,j,k} - \delta \pi'_{i,j,k}}{\Delta x} \quad (2.125)$$

gegeben ist, während für deren meridionale Ableitung

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial y} \right)_{i+1/2,j,k} = & \frac{1}{4} \left[\left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial y} \right)_{i,j-1/2,k} + \left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial y} \right)_{i,j+1/2,k} \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial y} \right)_{i+1,j-1/2,k} + \left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial y} \right)_{i+1,j+1/2,k} \right] \end{aligned} \quad (2.126)$$

mit

$$\left(\frac{\partial \delta \pi'}{\partial y} \right)_{i,j+1/2,k} = \frac{\delta \pi'_{i,j+1,k} - \delta \pi'_{i,j,k}}{\Delta y} \quad (2.127)$$

gilt. Abschließend wird die räumliche Diskretisierung der Poisson-Gleichung (2.107) an den zentralen Gitterpunkten einer skalaren Gitterzelle ausgewertet

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot \left[\bar{P}^\circ (\mathbf{v}^{*,n+1} - \langle w \rangle^\circ \mathbf{e}_z) \right] |_{i,j,k} - (S^\circ - \langle S \rangle^\circ)_{i,j,k} \\ &= \bar{P}_k^\circ \frac{u_{i+1/2,j,k}^{*,n+1} - u_{i-1/2,j,k}^{*,n+1}}{\Delta x} + \bar{P}_k^\circ \frac{v_{i,j+1/2,k}^{*,n+1} - v_{i,j-1/2,k}^{*,n+1}}{\Delta y} \\ &+ \frac{\bar{P}_{k+1/2}^\circ w_{i,j,k+1/2}^{*,n+1} - \bar{P}_{k-1/2}^\circ w_{i,j,k-1/2}^{*,n+1}}{\Delta z} \\ &+ \frac{(\bar{P} \langle w \rangle)_{k+1/2}^\circ - (\bar{P} \langle w \rangle)_{k-1/2}^\circ}{\Delta z} - S_{i,j,k}^\circ - \langle S \rangle_k^\circ, \end{aligned} \quad (2.128)$$

welche außerdem analog für Terme innerhalb der eckigen Klammern in (2.108) gilt.

2.4.7 Zusammenfassung des numerischen Algorithmus

Abschließend erfolgt eine stichpunktartige Übersicht zum Lösen von (2.70) - (2.75):

- Initialisierung inkl. anfängliche Druckkorrektur zur gewährleistung der Divergenzbedingung (2.107) und Ausgabe der initialisierten Felder
- Zeitschleife
 0. - Synchronisation der Dichtefluktuation (2.87)
 1. - Rekonstruktion von ρ/\bar{P} , ρ'/\bar{P} , $\rho \mathbf{v}/\bar{P}$ (2.115-2.117)
 - Berechnung der advektiven Flüsse (2.114 und 2.123)
 - Explizite Integration der linken Seiten über $\Delta t/2$
 2. - Explizite Integration von \bar{P} über $\Delta t/2$ (2.79)
 - Prädiktorschritt über $\Delta t/2$ (2.102-2.105)
 - ggf. Anwendung eines Shapiro-Filters (Anhang C und Kapitel 4)
 - Iteratives Lösen der Poissongleichung (2.107)
 - Korrektorschritt über $\Delta t/2$ (2.98-2.101)
 3. - Explizite Integration der rechten Seiten über $\Delta t/2$ (2.83)
 - ggf. Anwendung eines Shapiro-Filters
 - 4.+5. - Analoge Vorgehensweise zu 1. und 2. über Δt
- finale Synchronisation der Dichtefluktuation, Postprocessing und Ausgabe der finalen Felder

Kapitel 3

Die Modellvalidierung

*The man of science has learned to believe in justification,
not by faith, but by verification.*

– Thomas H. Huxley

In diesem Abschnitt wird das in Kapitel 2 vorgestellte numerische Verfahren anhand einer Reihe idealisierter, atmosphärischer Modellsimulationen validiert. Dabei werden neben dem numerischen Konvergenzverhalten und der Stabilität von *PincFlow* auch die Übereinstimmung mit Ergebnissen aus der Literatur und einem expliziten Zeitschrittverfahren überprüft. Aus Gründen der Einfachheit, aber ohne Einschränkung der Allgemeinheit, beschränkt sich die Diskussion dabei auf zweidimensionale Testfälle ohne analytisch balancierten Gleichgewichtszustand (vgl. Abschnitt 2.4.3) und ohne Rayleigh-Dämpfung der Geschwindigkeitsfelder (vgl. 2.40).

Die Validierung wird in zwei Schritte unterteilt: In adiabatische und diabatische Testfälle. Im ersten Schritt (vgl. Kapitel 3.1) werden, in Anlehnung an die Arbeiten von Rieper et al. (2013); Benacchio (2014) und Benacchio und Klein (2019), unter Vernachlässigung der Heizung die Genauigkeitsordnung sowie Effizienz von *PincFlow* mit semi-impliziten Zeitschrittverfahren (*PincFlow mit SI*) verifiziert. In Abschnitt 3.1.1 wird die Advektion eines rotierenden Wirbels (Kadioglu et al., 2008) betrachtet und die numerische Konvergenz des Verfahrens überprüft. Anschließend wird in Abschnitt 3.1.2 anhand von Simulationen unterschiedlicher ruhender Atmosphärenzustände die Stabilität von *PincFlow mit SI* über lange Modellläufe mit einer großen Anzahl an Zeitschritten validiert (Benacchio, 2014). Zur Bewertung der Effizienz des semi-impliziten Zeitintegrationsschemas wird in Abschnitt 3.1.3 der Testfall nicht-hydrostatischer Schwerewellen von Skamarock und Klemp (1994) sowie dessen Erweiterung zur Simulation von gröberskaligen Konfigurationen von Benacchio und Klein (2019) durchgeführt, wobei als Effizienzmaßstab

die Simulationsergebnisse von *PincFlow* mit explizitem Runge-Kutte Verfahren dritter Ordnung (*PincFlow mit RK3*) dienen.

Im zweiten Schritt (vgl. Kapitel 3.2) werden, basierend auf der Arbeit von Benacchio und Klein (2019) und Almgren et al. (2006), eine Reihe von Modellsimulationen diabatischer Prozesse durchgeführt. Durch den Testfall einer kalten Blase in Abschnitt 3.2.1 wird dabei zunächst die Implementierung der Heizung in Zusammenhang mit der entsprechenden Entwicklung der Referenzatmosphäre validiert, während in den Abschnitt 3.2.2 an drei Beispielen mit lokaler Heizung der Einfluss des zeitabhängigen Hintergrundzustandes auf die Strömung näher beleuchtet wird.

3.1 Adiabatische Testfälle

3.1.1 Glatter Wirbel

Modellkonfiguration

Zuerst wird ein Testfall durchgeführt, dessen exakte Lösung bekannt ist und für den $g = 0$ und $f = 0$ gilt¹, so dass die Validierung der numerischen Behandlung der Advektion im Mittelpunkt steht. Es wird ein achsensymmetrischer, gegen den Uhrzeigersinn rotierender Wirbel² mit konstantem Radius $R = 0.4$ m simuliert (Kadioglu et al., 2008), welcher diagonal auf einer quadratischen Ebene der Ausdehnung $(x, y) \in [0, 1]^2$ m² mit der konstanten Strömung $u_c = v_c = 1$ m s⁻¹ advehiert wird, sodass

$$x_c(t) = x_c(t=0) + u_c t \quad \text{und} \quad y_c(t) = y_c(t=0) + v_c t, \quad (3.1)$$

wobei $(x_c(t), y_c(t))$ das Zentrum des Wirbels mit der Anfangsbedingung $x_c(0) = y_c(0) = 0.5$ m angibt. Darüber hinaus wird ein konstanter isothermer Referenzzustand mit $\rho_r = 0.5$ kg m⁻³, $p_r = 101\,625$ Pa und $T_r = 706.098$ K angenommen.

¹Die Schwerebeschleunigung und der Coriolisparameter werden in (2.36) vernachlässigt.

²Die Beschreibung und Auswertung des Testfalls in dieser Arbeit basiert auf Benacchio (2014) und Benacchio et al. (2014).

Die Anfangsbedingungen der Dichte- und Horizontalengeschwindigkeitsfelder lauten mit $\rho_c = 0.5 \text{ kg m}^{-3}$

$$\begin{aligned}\rho(x, y) &= \begin{cases} \rho_c + 0.5(1 - r^2)^6 & \text{falls } r < 1, \\ \rho_c & \text{sonst} \end{cases} \\ u(x, y) &= \begin{cases} u_c - 1024\sin(\phi)(1 - r)^6 r^6 & \text{falls } r < 1, \\ u_c & \text{sonst} \end{cases} \\ v(x, y) &= \begin{cases} v_c + 1024\cos(\phi)(1 - r)^6 r^6 & \text{falls } r < 1, \\ v_c & \text{sonst} \end{cases}\end{aligned}\quad (3.2)$$

wobei die Koordinaten

$$\phi = \arctan \frac{y - y_c}{x - x_c} \quad \text{und} \quad r = \frac{\sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}}{R} \quad (3.3)$$

jeweils den Azimutwinkel und den Radius des Wirbels bezeichnen. Das anfängliche Exnerdruckfeld errechnet sich daraus mit

$$p(r) = p_c(r)\rho_c(u_c^2 + v_c^2) \quad (3.4)$$

und

$$\begin{aligned}p_c(r) = & 1024^2 r^{12} \left[\frac{1}{72} r^{24} - \frac{6}{35} r^{23} + \frac{15}{17} r^{22} - \frac{74}{33} r^{21} + \frac{57}{32} r^{20} + \frac{174}{31} r^{19} \right. \\ & - \frac{269}{15} r^{18} + \frac{450}{29} r^{17} + \frac{153}{8} r^{16} - \frac{1564}{27} r^{15} + \frac{510}{13} r^{14} + \frac{204}{5} r^{13} \\ & - \frac{1}{24} (2210 - \rho_{dl}) r^{12} + \frac{12}{23} (85 - \rho_{dl}) r^{11} + \left(\frac{510}{11} + 3\rho_{dl} \right) r^{10} \\ & - \frac{4}{21} (391 + 55\rho_{dl}) r^9 + \frac{9}{40} (119 + 110\rho_{dl}) r^8 + \frac{18}{19} (25 - 44\rho_{dl}) r^7 \\ & - \frac{1}{9} (269 - 462\rho_{dl}) r^6 + \frac{6}{17} (29 - 132\rho_{dl}) r^5 + \frac{3}{16} (19 + 165\rho_{dl}) r^4 \\ & \left. - \frac{2}{15} (37 + 110\rho_{dl}) r^3 + \frac{3}{7} (5 + 11\rho_{dl}) r^2 - \frac{6}{13} (1 + 2\rho_{dl}) r + \frac{1}{24} (1 + 2\rho_{dl}) \right] \end{aligned}\quad (3.5)$$

sowie $\rho_{dl} = (1 + 0.5(1 - r^2)^6)/\rho_c$ über

$$\pi(x, y) = \begin{cases} \left(\frac{p(r) - p(1)}{p_{ref}} \right)^{\frac{R}{c_p}} & \text{falls } r < 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.6)$$

Tabelle 3.1: Dichtemaximum des glatten, rotierenden Wirbels zu den Zeitpunkten $t = 0, 1, 2$ s für *PincFlow mit SI* jeweils mit (vgl. 2.118) und ohne (d.h. $\eta = 1$) Limiterfunktion.

Zeitpunkt [s]	Limiterfunktion	ρ_{max} [kg m ⁻³]
0 s	ja	0.9997
	nein	0.9997
1 s	ja	0.9948
	nein	0.9999
2 s	ja	0.9930
	nein	0.9999

Die zweidimensionale Domäne wird mit 192×192 Gitterzellen diskretisiert, was einer horizontalen Auflösung von $\Delta x = \Delta y \approx 5.21 \times 10^{-3}$ m entspricht, und die zeitliche Diskretisierung ergibt sich über das CFL Kriterium (vgl. 2.54), wobei analog zu Benacchio et al. (2014) $\nu = 0.45$ gesetzt ist, sodass $\Delta t \approx 2.1 \times 10^{-3}$ s ist. Ferner wird für das BiCGSTAB-Verfahren eine relative Toleranzgrenze von $\epsilon_p = 10^{-12}$ gewählt (vgl. 2.108). Der vorliegende Testfall wird bis zum Integrationszeitpunkt $t = 2$ s simuliert, sodass der Wirbel sich insgesamt zweimal diagonal über die gesamte Domäne fortbewegt (d.h. nach jeder simulierten Sekunde befindet sich der Wirbel wieder an seiner Ausgangsposition). Es werden zu den Zeitpunkten $t = 1, 2$ s Ergebnisdaten der Variablenfelder ausgeschrieben und der Drucklöser (vgl. 2.107) benötigt durchschnittlich 110 Iterationen.

Zeitliche Entwicklung der prognostizierten Felder

In Abbildung 3.1 sind die Anfangsbedingungen von *PincFlow mit SI* sowie die Ergebnisse zu den Zeitpunkten $t = 1, 2$ s dargestellt. Außerdem sind die Differenzen der prognostizierten Felder vom Anfangszustand abgebildet. Der Wirbel wird innerhalb einer Sekunde diagonal über die gesamte Domäne advehiert, sodass die Felder auch nach einer Integrationszeit von 2 s noch die gleiche Anordnung haben, wobei die Dichte ein Maximum im Zentrum der Domäne besitzt und die u - und v -Komponenten des Windfeldes jeweils um 90° zueinander gedreht sind. Das Advektionsschema simuliert somit die Bewegung des Wirbels mit der korrekten Geschwindigkeit (Benacchio, 2014). Bei genauerer Betrachtung der Plots ist allerdings zu erkennen, dass das Dichtemaximum im Zentrum des Wirbels mit der Zeit (wenn auch nur geringfügig) abnimmt (vgl. Tabelle 3.1).

Wie bereits in Abschnitt 2.4.6 angeführt, kann die Anwendung einer Limiterfunktion (vgl. 2.118) lokal die Genauigkeit und das Konvergenzverhalten der numerischen Me-

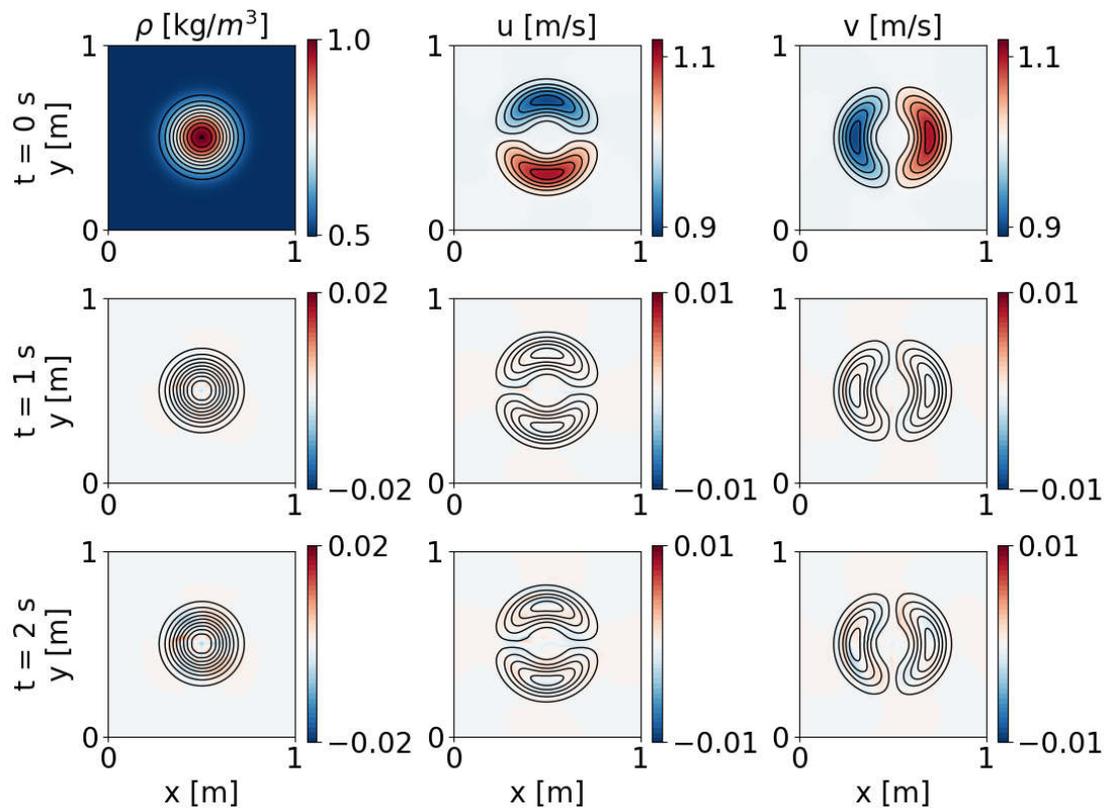


Abbildung 3.1: Vergleich der prognostizierten Felder für *PincFlow mit SI*, wobei innerhalb des Advektionsschemas die Limiterfunktion (2.118) verwendet wird. Die schwarzen Linien zeigen jeweils die Dichtefelder (linke Spalte, Konturlinien zwischen $[0.499, 1.0]$ kg m⁻³ mit einem Konturintervall von 0.05 kg m⁻³) sowie die horizontalen Geschwindigkeitsfelder u und v (mittlere und rechte Spalte, Konturlinien jeweils zwischen $[0.89, 1.1]$ m s⁻¹ mit einem Konturintervall von 0.02 m s⁻¹) zu den Zeitpunkten $t = 0, 1, 2$ s (von oben nach unten). Farbig gekennzeichnet sind die anfänglichen Felder (obere Zeile, vgl. 3.2), sowie die Differenzen der prognostizierten Felder (zum Zeitpunkt $t = 1$ s und 2 s) vom Anfangszustand (mittlere und untere Zeile).

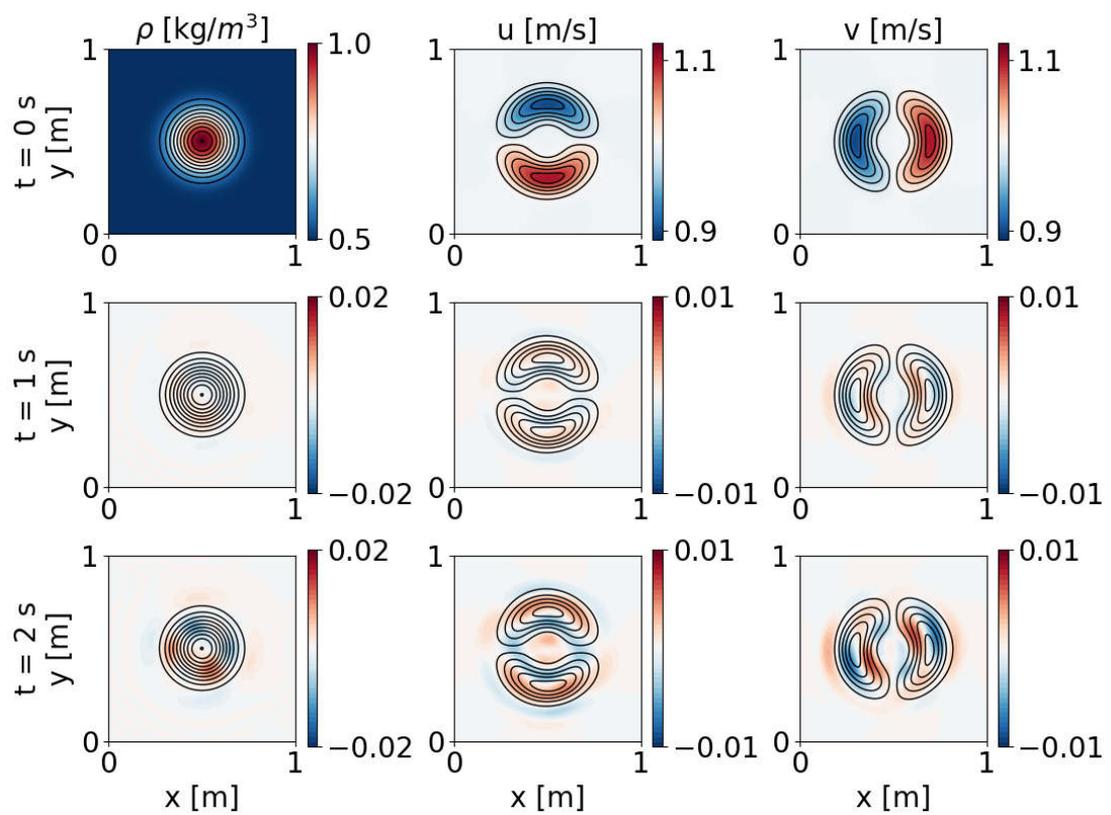


Abbildung 3.2: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung 3.1 für *PincFlow mit SI* gezeigt, jedoch ohne Limiterfunktion (d.h. $\eta = 1$).

thode beeinträchtigen (Kadioglu et al., 2008; Klein, 2009). Zur näheren Untersuchung wird daher zusätzlich eine Simulation durchgeführt, bei welcher das Modell innerhalb des Advektionsschemas keine Limiterfunktion (d.h. $\eta = 1$) verwendet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.2 dargestellt und zeigen ein recht konstant bleibendes Dichtemaximum. Dies unterstützt die Annahme, dass die oben beschriebene Abnahme des Dichtemaximums sowie das Auftreten von lokalen Ungenauigkeiten auf die Limiterfunktion zurückzuführen ist, wenngleich auch größere Abweichungen zum Zeitpunkt $t = 2$ s im Bereich der äußeren Konturen der Felder zu beobachten sind. Höchstwahrscheinlich kann die Ursache dieser jedoch auf physischen Instabilitäten, die sich nach der zweiten Runde entwickeln, zurückgeführt werden (Benacchio, 2014).

Empirische Konvergenzstudie in Bezug auf die Anfangsbedingungen

Darüber hinaus sind zur Validierung des numerischen Konvergenzverhaltens von *PincFlow mit SI* in Abbildung 3.3 und Tabelle 3.2, analog zur Analyse von Benacchio (2014), zusätzlich die relativen Fehler der diskreten Dichte- und Geschwindigkeitsfelder ($\phi = \rho, u, v$) zum Zeitpunkt $t = 1$ s in Bezug auf die Anfangsbedingungen und in Abhängigkeit verschiedener Gitterauflösungen (mit N Gitterzellen) dargestellt, d.h.

$$\epsilon_\phi(\phi_N) \equiv \frac{\|\phi_N(t = 1 \text{ s}) - \phi_N(t = 0 \text{ s})\|_k}{\|\phi_N(t = 1 \text{ s})\|_k}, \quad k \in [2, \infty], \quad (3.7)$$

wobei in dieser Arbeit jeweils die Euklidische-Norm L_2 und die Supremumsnorm L_∞ eines Vektors $\mathbf{a} = \{a\}_{i=1}^N$

$$\|\mathbf{a}\|_2 = \left(\sum_i |a_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad \|\mathbf{a}\|_\infty = \max_i |a_i| \quad (3.8)$$

verwendet werden. Ferner ergeben sich die Konvergenzraten über

$$\sigma_\phi(\phi_N) \equiv \log_2 \left(\frac{\epsilon_\phi(\phi_{N/2})}{\epsilon_\phi(\phi_N)} \right), \quad (3.9)$$

welche für *PincFlow* im Idealfall $\sigma_\phi = 2$ ergeben sollten³ (vgl. Abschnitt 2.4.5 und Abschnitt 2.4.6).

³Eine Konvergenzrate von 2 bedeutet eine quadratische Abnahme des relativen Fehlers bei Verdopplung der Gitterauflösung.

Tabelle 3.2: Vergleich der relativen L_2 und L_∞ Fehler zum Zeitpunkt $t = 1$ s in Bezug auf die Anfangsbedingungen und die zugehörigen Konvergenzraten für den Testfall eines glatten Wirbels (Kadioglu et al., 2008), jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* mit (schwarz) bzw. ohne (grau) Limiterfunktion in Abhängigkeit verschiedener Gitterauflösungen (mit N Gitterzellen).

N	ϵ_ρ	σ_ρ	ϵ_u	σ_u	ϵ_v	σ_v
L_2	4.68×10^{-3}		1.29×10^{-3}		1.57×10^{-3}	
	1.14×10^{-2}		5.84×10^{-3}		6.06×10^{-3}	
	2.33×10^{-3}		6.66×10^{-4}		7.74×10^{-4}	
	5.16×10^{-3}		2.71×10^{-3}		2.92×10^{-3}	
	1.45×10^{-3}	1.68	4.22×10^{-4}	1.61	4.72×10^{-4}	1.73
	2.96×10^{-3}	1.94	1.53×10^{-3}	1.93	1.69×10^{-3}	1.83
	7.86×10^{-4}	1.57	2.30×10^{-4}	1.54	2.41×10^{-4}	1.69
	1.38×10^{-3}	1.90	6.77×10^{-4}	2.00	7.93×10^{-4}	1.88
	7.14×10^{-3}		1.61×10^{-3}		2.11×10^{-3}	
	1.22×10^{-2}		7.81×10^{-3}		8.99×10^{-3}	
L_∞	3.48×10^{-3}		9.21×10^{-4}		9.60×10^{-4}	
	5.21×10^{-3}		3.39×10^{-3}		4.21×10^{-3}	
	2.13×10^{-3}	1.74	6.03×10^{-4}	1.42	5.43×10^{-4}	1.96
	2.89×10^{-3}	2.08	1.81×10^{-3}	2.11	2.47×10^{-3}	1.87
	1.05×10^{-3}	1.72	3.42×10^{-4}	1.43	2.89×10^{-4}	1.73
	1.29×10^{-3}	2.02	7.58×10^{-4}	2.16	1.14×10^{-3}	1.88

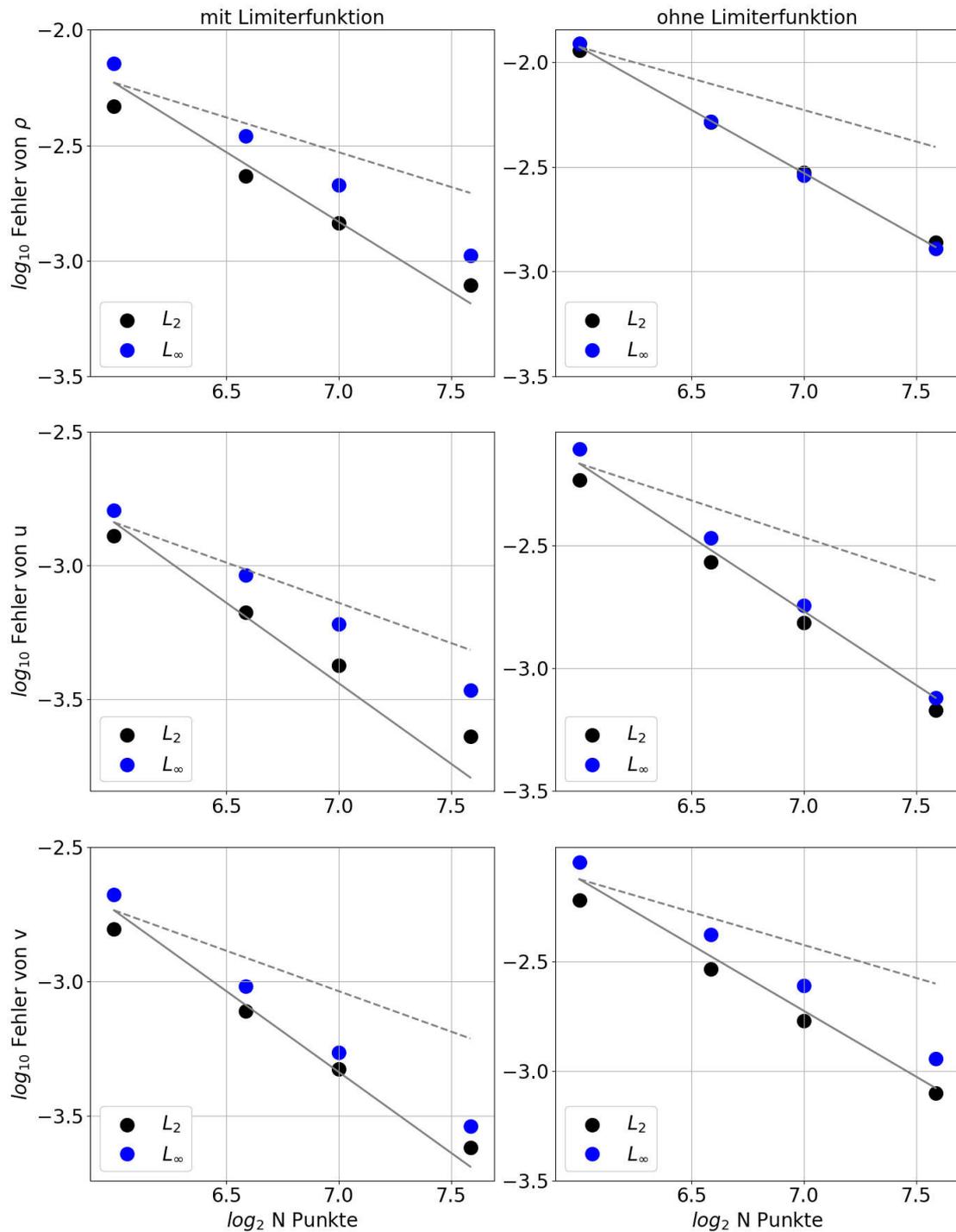


Abbildung 3.3: Dargestellt sind die relativen L_2 und L_∞ Fehler (schwarze und blaue Punkte) der Dichte- (obere Zeile) sowie u- (mittlere Zeile) und v-Winde (untere Zeile) zum Zeitpunkt $t = 1$ s in Bezug auf die Anfangsbedingungen sowie die Konvergenzraten 1 (grau-gestrichelte Linie) und 2 (graue durchgezogene Linie) für den Testfall eines glatten Wirbels (Kadioglu et al., 2008), jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* mit (linke Spalte) bzw. ohne (rechte Spalte) Limiterfunktion in Abhängigkeit verschiedener Gitterauflösungen (mit N Gitterzellen).

Ein Vergleich der Ergebnisse zwischen den Simulationen mit und ohne Limiterfunktion unterstützen die oben genannten Beobachtungen der zweidimensionalen Felder, dass im Testfall des betrachteten glatten Wirbels die Verwendung einer Limiterfunktion im Advektionsschema zu einer geringeren Genauigkeit und einem suboptimalen Konvergenzverhalten führt: Während die Ergebnisse der Modellläufe ohne Limiterfunktion die erwartete Konvergenzrate von ≈ 2 anzeigen, ergeben sich aus den Simulationen mit Limiterfunktion zu geringe Konvergenzraten, die im Bereich zwischen $1.42 \leq \sigma_\phi \leq 1.96$ liegen.

Empirische Konvergenzstudie in Bezug auf hochaufgelöste Simulationen

Zur weiteren Analyse des Konvergenzverhaltens wird außerdem eine zweite Konvergenzuntersuchung durchgeführt, bei der die relativen Fehler in Bezug auf das Ergebnis einer hochaufgelösten Simulation zum Zeitpunkt $t = 1$ s berechnet werden (Benacchio, 2014). Durch lineare Interpolation der hochaufgelösten Felder (768×768 bzw. 1024×1024) auf die jeweils gröberen Gitterauflösungen (64×64 , 128×128 , 256×256 , 512×512 bzw. 96×96 , 192×192 , 384×384) ergeben sich die relativen Fehlermaße und Konvergenzraten dabei analog zu (3.7) über

$$\epsilon_\phi(\phi_N) \equiv \frac{\|\phi_N(t = 1 \text{ s}) - \phi_{\text{interpoliert}}(t = 1 \text{ s})\|_k}{\|\phi_N(t = 1 \text{ s})\|_k}, \quad k \in [2, \infty] \quad (3.10)$$

und (3.9).

Die Resultate sind in Tabelle 3.3 sowie den Abbildungen 3.4 und 3.5 zusammengefasst. Allgemein weisen die errechneten L_2 und L_∞ Fehler nur geringe Unterschiede auf und entsprechen zum größten Teil den Größenordnungen $\mathcal{O}(10^{-4}) - \mathcal{O}(10^{-3})$. Auch wenn für grobe Auflösungen zu niedrige Konvergenzraten im Bereich von $1.1 < \sigma_\phi < 1.6$ beobachtet werden können, werden in Simulationen mit hohen Auflösungen die erwarteten Werte von $1.89 \leq \sigma_\phi \approx 2$ erreicht und bestätigen somit die Genauigkeit zweiter Ordnung der prognostizierten Felder (Benacchio, 2014).

Tabelle 3.3: Vergleich der relativen L_2 und L_∞ Fehler zum Zeitpunkt $t = 1$ s in Bezug auf die Ergebnisse hochauflöster Simulationen mit 768×768 (obere Tabelle) bzw. 1024×1024 (untere Tabelle) Gitterzellen und die zugehörigen Konvergenzraten für den Testfall eines glatten Wirbels (Kadioglu et al., 2008), jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* mit (schwarz) und ohne Limiterfunktion (grau) in Abhängigkeit verschiedener Gitterauflösungen (mit N Gitterzellen).

N	ϵ_ρ	σ_ρ	ϵ_u	σ_u	ϵ_v	σ_v		
L_2	96		7.89×10^{-3}		1.72×10^{-3}		1.95×10^{-3}	
			1.20×10^{-2}		3.96×10^{-3}		4.28×10^{-3}	
	192		3.35×10^{-3}	1.24	7.02×10^{-4}	1.30	8.19×10^{-4}	1.25
			4.29×10^{-3}	1.48	1.23×10^{-3}	1.69	1.37×10^{-3}	1.64
	384		1.11×10^{-3}	1.59	2.31×10^{-4}	1.60	2.70×10^{-4}	1.60
			1.29×10^{-3}	1.73	3.30×10^{-4}	1.89	3.78×10^{-4}	1.86
N	ϵ_ρ	σ_ρ	ϵ_u	σ_u	ϵ_v	σ_v		
L_∞	96		8.34×10^{-3}		1.87×10^{-3}		2.06×10^{-3}	
			1.13×10^{-2}		4.75×10^{-3}		5.52×10^{-3}	
	192		3.42×10^{-3}	1.27	7.60×10^{-4}	1.30	8.38×10^{-4}	1.30
			3.83×10^{-3}	1.56	1.44×10^{-3}	1.72	1.66×10^{-3}	1.73
	384		1.23×10^{-3}	1.60	2.51×10^{-4}	1.60	2.72×10^{-4}	1.62
			1.14×10^{-3}	1.75	3.87×10^{-4}	1.89	4.30×10^{-4}	1.95
N	ϵ_ρ	σ_ρ	ϵ_u	σ_u	ϵ_v	σ_v		
L_2	64		1.29×10^{-2}		2.92×10^{-3}		3.10×10^{-3}	
			2.22×10^{-2}		7.74×10^{-3}		8.14×10^{-3}	
	128		5.88×10^{-3}	1.13	1.25×10^{-3}	1.22	1.45×10^{-3}	1.10
			8.14×10^{-3}	1.44	2.51×10^{-3}	1.63	2.76×10^{-3}	1.56
	256		2.50×10^{-3}	1.23	5.21×10^{-4}	1.27	6.09×10^{-4}	1.25
			3.03×10^{-3}	1.43	8.08×10^{-4}	1.63	9.15×10^{-4}	1.59
512		8.31×10^{-4}	1.59	1.72×10^{-4}	1.59	2.02×10^{-4}	1.59	
		9.35×10^{-4}	1.70	2.27×10^{-4}	1.83	2.62×10^{-4}	1.81	
N	ϵ_ρ	σ_ρ	ϵ_u	σ_u	ϵ_v	σ_v		
L_∞	64		1.37×10^{-2}		3.10×10^{-3}		3.26×10^{-3}	
			2.21×10^{-2}		1.01×10^{-3}		1.11×10^{-2}	
	128		6.07×10^{-3}	1.18	1.38×10^{-3}	1.17	1.31×10^{-3}	1.11
			7.45×10^{-3}	1.56	2.90×10^{-3}	1.79	3.45×10^{-3}	1.69
	256		2.52×10^{-3}	1.27	5.66×10^{-4}	1.28	6.17×10^{-4}	1.30
			2.67×10^{-3}	1.48	9.49×10^{-4}	1.61	1.07×10^{-3}	1.68
512		8.33×10^{-4}	1.60	1.87×10^{-4}	1.60	2.03×10^{-4}	1.60	
		8.31×10^{-4}	1.68	2.63×10^{-4}	1.85	2.89×10^{-4}	1.89	

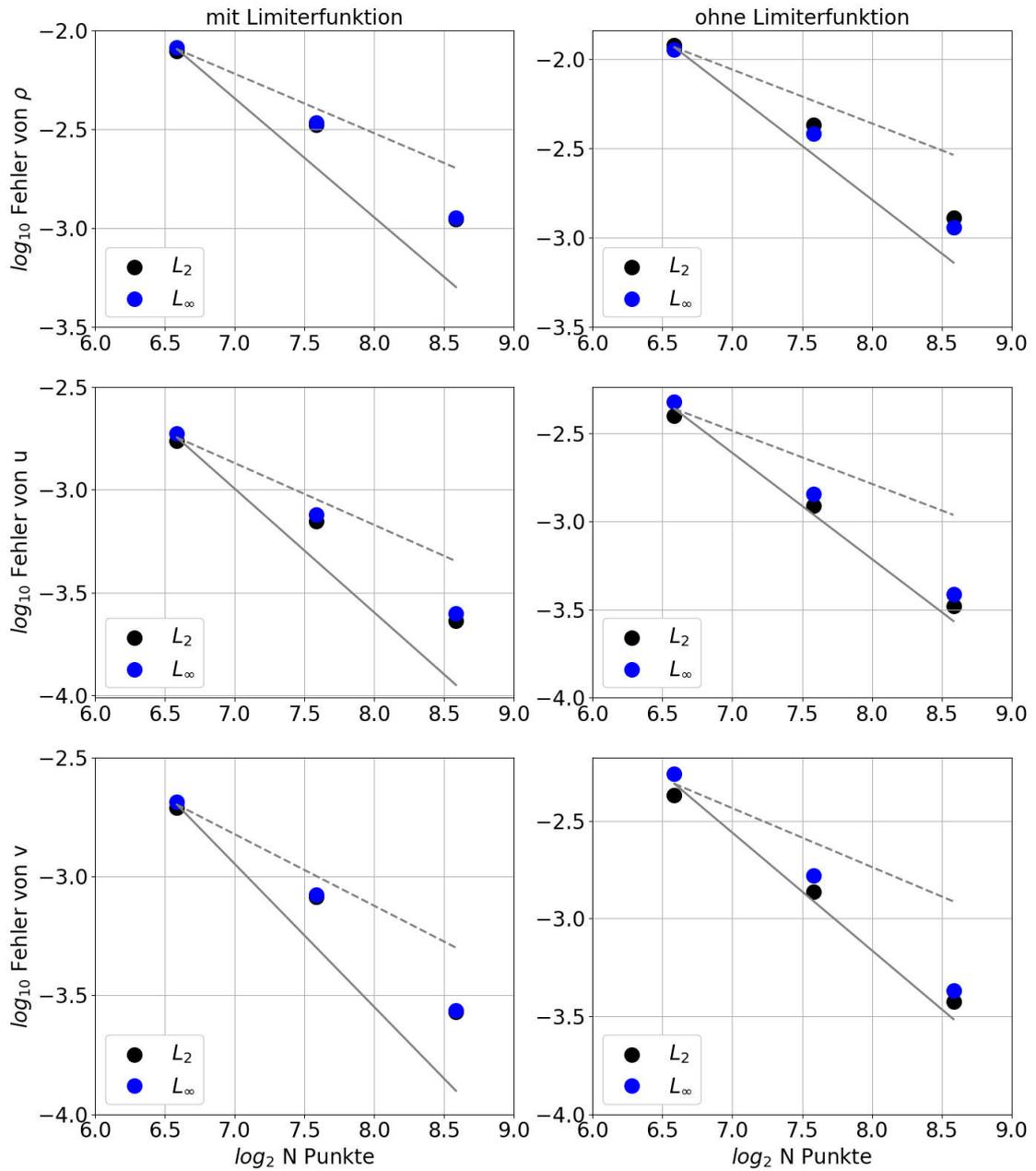


Abbildung 3.4: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung 3.3 für die relativen Fehler in Bezug auf das Ergebnis einer hochauflösten Simulation mit 768×768 Gitterzellen gezeigt.

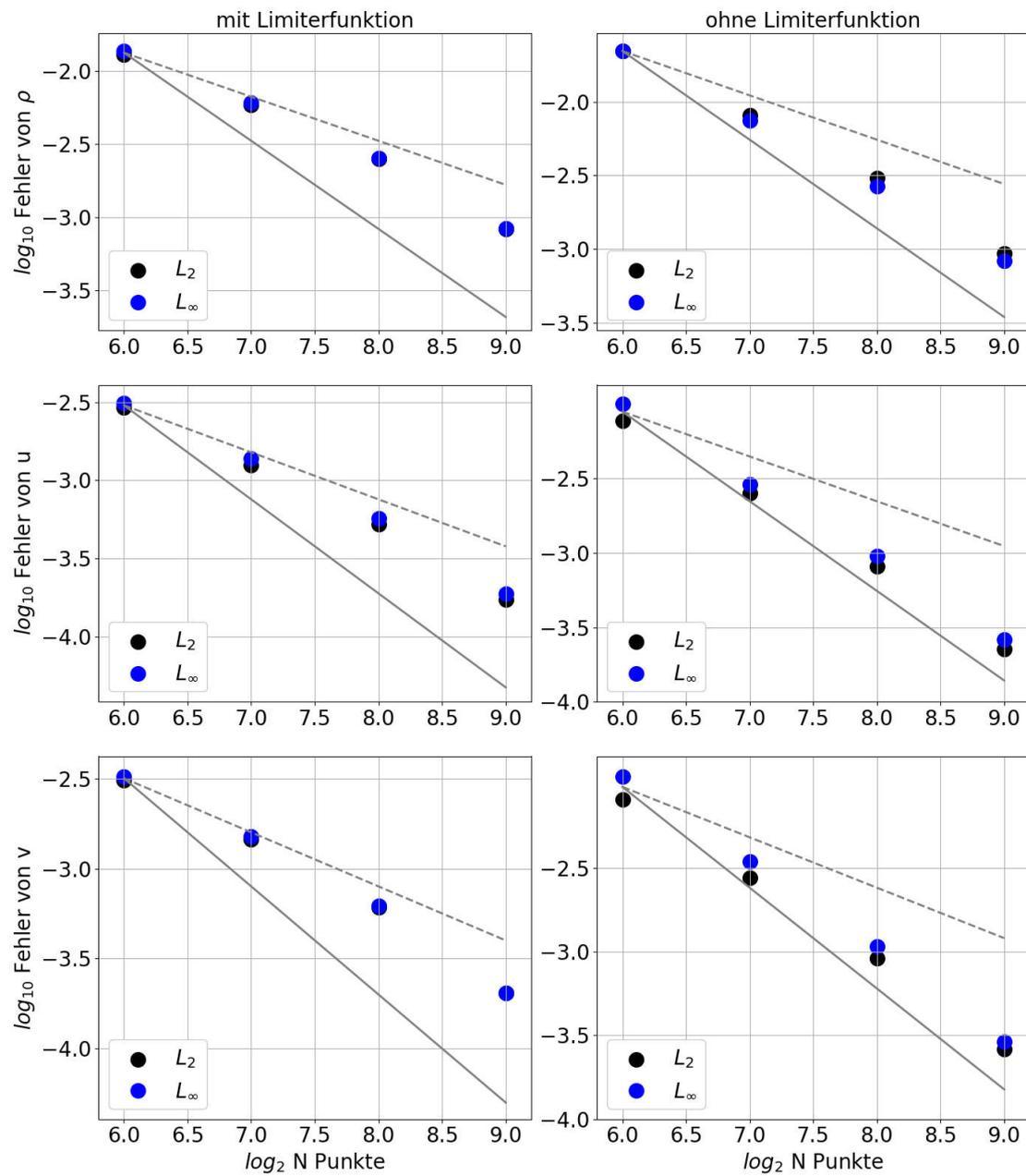


Abbildung 3.5: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung 3.4 für die relativen Fehler in Bezug auf das Ergebnis einer hochaufgelösten Simulation mit 1024×1024 Gitterzellen gezeigt.

3.1.2 Ruhende Atmosphäre

Im zweiten Testfall⁴ wird jeweils in einer Reihe von drei Simulationen mit unterschiedlichen Referenzzuständen eine Atmosphäre, die sich in Ruhe befindet, initialisiert. Anhand des Testfalls soll validiert werden, dass *PincFlow mit SI* auch bei Simulationen über lange Zeiträume, welche eine hohe Anzahl an Zeititerationen benötigen, stabil bleibt (d.h. es gilt für alle Zeiten $\mathbf{v} = 0 \text{ m s}^{-1}$, $\rho = \rho_r(z)$, $\pi = \pi_r(z)$) und somit keine kleinskaligen Fluktuationen entwickelt, deren Größenordnung wesentlich oberhalb der Maschinengenauigkeit liegen (Benacchio, 2014).

Im Speziellen werden die folgenden Referenzzustände betrachtet:

1. Neutral geschichtete Atmosphäre ($N = 0 \text{ s}^{-1}$):

Es wird angenommen, dass die potentielle Temperatur der Referenzatmosphäre konstant ist ($\theta_{ref} = 300 \text{ K}$), d.h. (vgl. z.B. Botta et al., 2004; Benacchio, 2014)

$$\theta_r(z) = \theta_{ref}, \quad \bar{P}(z) = p_{ref} \left(1 - \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{g}{R\theta_{ref}} z \right)^{\frac{1}{\gamma-1}}. \quad (3.11)$$

2. Homogene Atmosphäre ($N = \text{konst.} = 0.018 \text{ s}^{-1}$):

Es wird angenommen, dass die potentielle Temperatur der Referenzatmosphäre mit der Höhe variiert, wobei $d\theta_r/dz > 0$, $N = 0.018 \text{ s}^{-1}$ und $\theta_{ref} = 300 \text{ K}$ ist, d.h. (vgl. z.B. Restelli und Giraldo, 2009; Skamarock und Klemp, 1994; Benacchio et al., 2014)

$$\begin{aligned} \theta_r(z) &= \theta_{ref} \exp\left(\frac{N^2}{g} z\right), \\ \bar{P}(z) &= p_{ref} \left\{ 1 + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{g^2}{N^2 R \theta_{ref}} \left[\exp\left(\frac{-N^2}{g} z\right) - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{\gamma-1}}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

3. Isotherme Atmosphäre ($N \rightarrow N(z)$):

Es wird angenommen, dass die Temperatur der Referenzatmosphäre konstant ist ($T_{ref} = 300 \text{ K}$), d.h. (vgl. z.B. Rieper et al., 2013)

$$\theta_r(z) = T_{ref} \exp\left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{zg}{RT_{ref}}\right), \quad \bar{P}(z) = p_{ref} \exp\left(\frac{-zg}{\gamma RT_{ref}}\right). \quad (3.13)$$

Zu beachten ist, dass in allen drei Fällen $b = 0$ gilt, weshalb die Problematik, dass durch die verwendete räumliche numerische Diskretisierung das geostrophische und hydrosta-

⁴Die Ausarbeitung orientiert sich an der Arbeit von Benacchio (2014).

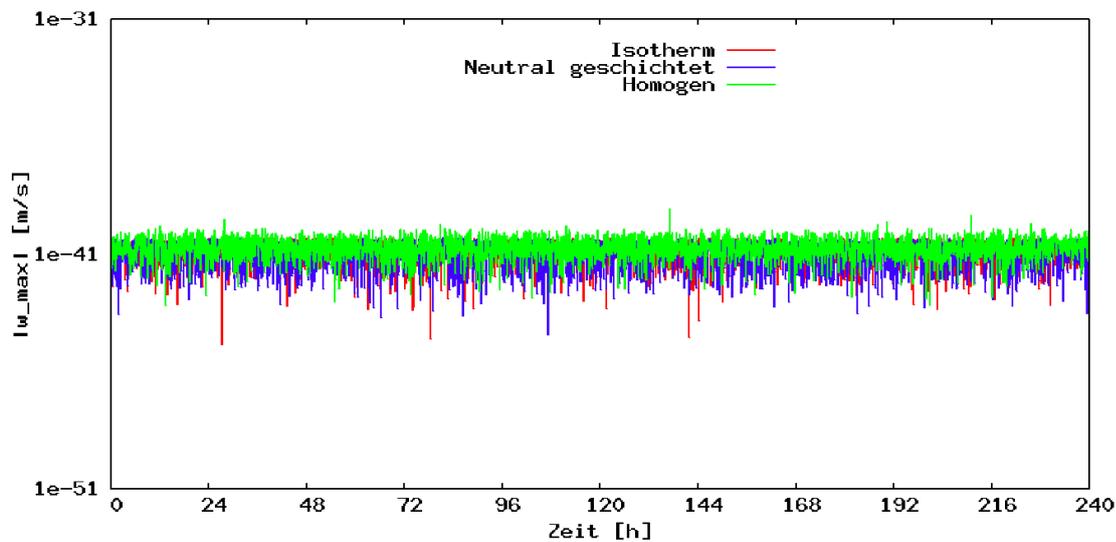


Abbildung 3.6: Gezeigt sind die zeitlichen Entwicklungen des absoluten Maximums der vertikalen Geschwindigkeitsfelder für die Modellläufe einer neutral geschichteten (blau), homogenen (grün) und isothermen (rot) Atmosphäre in Ruhe.

tische Gleichgewicht nicht ausreichend repräsentiert werden kann (vgl. Kapitel 2.4.5 und Anhang A) in diesem Abschnitt keine Rolle spielt.

Darüber hinaus wird jeweils eine quadratische Domäne der Größe $(x, z) \in [-5, 5] \times [0, 10]$ km² mit 80×80 Gitterzellen angenommen und es wird unter Verwendung eines konstanten Zeitschritts⁵ $\Delta t_{fix} = 1.9$ s (Benacchio, 2014) bis zum Integrationszeitpunkt $T_N = 864\,000$ s simuliert, sodass sich insgesamt 454737 Zeitschleifeniterationen ergeben. Die Abbildung 3.6 zeigt die zeitliche Variation des absoluten Maximums des vertikalen Geschwindigkeitsfeldes für die verschiedenen Modellläufe bis zum finalen Integrationszeitpunkt. Die Werte der Datentypen mit doppelter Genauigkeit wurden dabei jeweils alle 3600 s in Exponentenschreibweise mit 4 Stellen nach dem Komma ausgeschrieben. Insgesamt ist, unabhängig vom betrachteten Referenzzustand, kein Anstieg der dargestellten Größen zu erkennen. Die Größenordnung der Fluktuationen bleiben auch nach einer Vielzahl an simulierten Zeitschritten im Bereich der Maschinengenauigkeit und verifizieren somit die Stabilität von *PincFlow mit SI* (Benacchio, 2014).

⁵Da in diesem Testfall $\mathbf{v} = 0$ m s⁻¹ gilt, würden sich über das CFL-Kriterium unendlich lange Zeitschrittweiten ergeben.

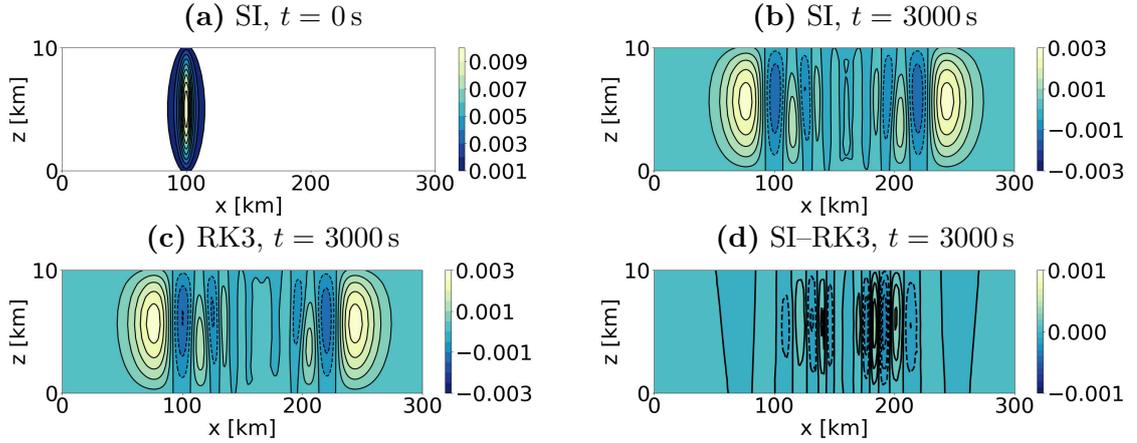


Abbildung 3.7: Potentielle Temperaturstörungen für den Testfall nicht-hydrostatischer Trägheitsschwerewellen von Skamarock und Klemp (1994) mit einer räumlichen Auflösung von $\Delta x = \Delta z = 1$ km für *PincFlow* mit *SI* (a und b), *PincFlow* mit *RK3* (c) und deren Differenz (d). In (a) kennzeichnen die Konturen Temperaturwerte zwischen $[0.001, 0.01]$ K mit einem Konturintervall von 0.001 K, während diese in (b und c) jeweils $[-0.003, 0.003]$ K mit einem Konturintervall 5×10^{-4} K gegeben sind und in (d) gilt $[-0.001, 0.001]$ K mit einem 1×10^{-4} K Intervall. Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

3.1.3 Trägheitsschwerewellen

Modellkonfiguration

Im dritten Testfall⁶ werden, basierend auf den Arbeiten von Skamarock und Klemp (1994) und Benacchio und Klein (2019), Trägheitsschwerewellen simuliert, welche sich durch eine Atmosphäre mit der konstanten Schichtung $N = 0.01 \text{ s}^{-1}$ (vgl. Fall Nr. 2 in Abschnitt 3.1.2) und einem konstanten horizontalen Wind $u = 20 \text{ m s}^{-1}$ ausbreiten. Eine Störung der potentiellen Temperatur der Form

$$\theta' = 0.01 \text{ K} \frac{\sin(\pi z/H)}{1 + [(x - x_0)/a]^2}, \quad (3.14)$$

wird anfänglich um $x_0 = 100$ km zentriert, wobei $a = 5$ km und $H = 10$ km ist (vgl. Abbildung 3.7a). Zur Simulation über die Laufzeit T_N dieses Testfalls wird eine zweidimensionale Domäne der Größe $(x, z) \in [0, x_N] \times [0, H]$ km² verwendet, welche auf 300×10 Gitterzellen diskretisiert wird, und es ist $x_N = 300$ km gesetzt. Darüber hinaus wird der Coriolisterm ($f = 0$) vernachlässigt und zur Berechnung der Größe des Zeitschrittes wird, analog zu Benacchio und Klein (2019), $\nu = 0.9$ (vgl. 2.54) festgelegt.

⁶Die Beschreibung und Ausarbeitung des Testfalls orientiert sich an Benacchio et al. (2014) und Benacchio und Klein (2019).

Tabelle 3.4: Vergleich der Maxima und Minima des horizontalen und vertikalen Geschwindigkeits- [10^{-2} m s^{-1} und 10^{-3} m s^{-1}] und potentiellen Temperaturfeldes [10^{-3} K] sowie der Exnerdruckfluktuationen [10^{-7}] für den Testfall nicht-hydrostatischer Trägheitsschwerewellen (Skamarock und Klemp, 1994), jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* und *PincFlow mit RK3*, sowie Ergebnisse von Restelli und Giraldo (2009) (*RG09*) und Benacchio et al. (2014) (*B14*), wobei die Indizes *FC* und $PI_{\rho,P}^{tc}$ jeweils deren voll-kompressibles und pseudo-inkompressibles Modell (äquivalent zum Modell von Durran, 1989) bezeichnen.

	u'_{max}	u'_{min}	w'_{max}	w'_{min}	θ'_{max}	θ'_{min}	π'_{max}	π'_{min}
<i>PincFlow mit SI</i>	1.04	-1.04	2.56	-2.34	2.79	-1.49	9.51	-6.29
<i>PincFlow mit RK3</i>	1.05	-1.06	2.62	-2.37	2.82	-1.51	9.64	-6.31
<i>RG09</i>	1.06	-1.06	2.88	-2.40	2.81	-1.51	9.11	-7.13
<i>B14_{FC}</i>	1.05	-1.06	2.74	-2.26	2.81	-1.53	7.75	-5.27
<i>B14_{PI_{\rho,P}^{tc}}</i>	1.06	-1.06	2.65	-2.42	2.81	-1.53	118	-6.56

Überblick der Modellergebnisse

Die Abbildungen 3.7a und b zeigen die anfängliche potentielle Temperaturstörung und deren Feld zum finalen Integrationszeitpunkt $T_N = 3000 \text{ s}$, welches im Verlauf der Simulation symmetrisch sowohl in positive als auch in negative x-Richtung propagiert, jedoch aufgrund des Horizontalwindes, nicht um x_0 zentriert bleibt. Ein qualitativer Vergleich des Feldes mit den Ergebnissen von Benacchio und Klein (2019) sowie Simulationen von *PincFlow mit RK3* (vgl. Abbildung 3.7c) zeigen insgesamt eine gute Übereinstimmung. Zusätzlich ist die Differenz der potentiellen Temperaturstörung zwischen *PincFlow mit SI* und *PincFlow mit RK3* in Abbildung 3.7d dargestellt, deren Wurzel der mittleren Fehlerquadratsumme (engl.: *root mean square error*, *RMSE*) und maximale absolute Abweichung jeweils $7.49 \times 10^{-5} \text{ K}$ und $3.70 \times 10^{-4} \text{ K}$ beträgt. Außerdem sind in Tabelle 3.4 die Maxima und Minima der simulierten Geschwindigkeits-, Temperatur- und Exnerdruckfluktuationen zum Zeitpunkt T_N zusammengefasst und entsprechen ebenfalls den Resultaten aus der Literatur (Restelli und Giraldo, 2009; Benacchio et al., 2014).

Empirische Untersuchung der physikalischen Erhaltungsprinzipien

Zur Überprüfung, dass *PincFlow* im adiabatischen Fall die physikalischen Prinzipien der Massenerhaltung, der Impulserhaltung sowie der Erhaltung der potentiellen Temperatur gewährleistet, werden weiterhin, analog zu Restelli und Giraldo (2009) und Benacchio et al. (2014), die relativen Erhaltungsfehler

Tabelle 3.5: Vergleich der relativen Fehler der Erhaltungsgrößen für den Testfall nicht-hydrostatischer Trägheitsschwerewellen (Skamarock und Klemp, 1994), simuliert mit *PincFlow mit SI*, mit Ergebnissen von Restelli und Giraldo (2009) (*RG09*) sowie Benacchio et al. (2014) (*B14*, vgl. Tabelle 3.4 für die Bedeutung der Indizes).

	C_ρ	$C_{\rho u}$	C_θ
<i>PincFlow mit SI</i>	2.15×10^{-9}	5.36×10^{-9}	4.16×10^{-9}
<i>GR09</i>	1.67×10^{-9}	2.6×10^{-7}	-
<i>B14_{FC}</i>	1.15×10^{-9}	8.05×10^{-11}	-
<i>B14_{P^{tc}_{ρ, P}}</i>	6.77×10^{-10}	9.66×10^{-10}	-

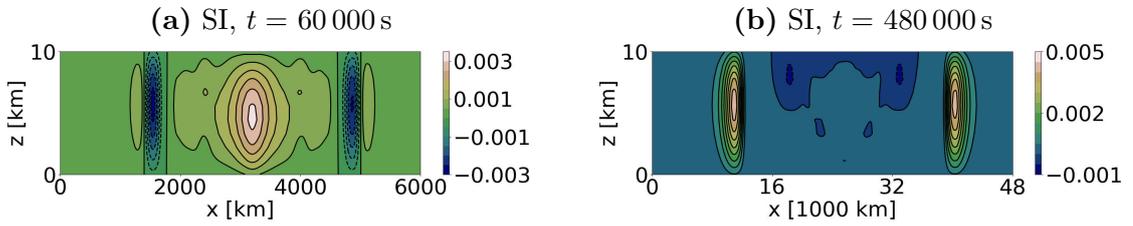


Abbildung 3.8: Es sind jeweils die potentiellen Temperaturstörungen zum Zeitpunkt T_N für die Testfälle hydrostatischer (a, $\Delta x = 20$ km) und planetarer (b, $\Delta x = 160$ km) Trägheitsschwerewellen (Benacchio und Klein, 2019) gezeigt. In (a) kennzeichnen die Konturen Temperaturwerte zwischen $[-0.003, 0.0035]$ K mit einem Konturintervall von 5×10^{-4} K, während diese in (b) über $[-0.001, 0.005]$ K mit einem Konturintervall 5×10^{-4} K gegeben sind. Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

$$C_\phi = \frac{|\langle \phi(T_N) \rangle - \langle \phi(t_0) \rangle|}{|\langle \phi(t_0) \rangle|} \quad (3.15)$$

berechnet, wobei $\langle \phi(t) \rangle = \int dV \phi(t)$ jeweils das Volumenintegral der Dichte- und zonalen Impuls- und potentiellen Temperaturfelder ($\phi = \rho, \rho u, \theta$) zum Zeitpunkt t über die betrachtete Domäne bezeichnet. Die Werte der berechneten Fehlermaße sind in Tabelle 3.5 zusammengefasst. Sie liegen in einem vergleichbaren Bereich zu Ergebnissen aus der Literatur und bestätigen mit Werten der Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-9})$ die Einhaltung der Erhaltungssätze durch *PincFlow mit SI*.

Effizienzstudie

Zur Quantifizierung der Effizienz von *PincFlow mit SI*, wird im nächsten Schritt der oben betrachtete Testfall gemäß der Arbeit von Benacchio und Klein (2019) erweitert, sodass einerseits mit $f \neq 0$, $x_N = 6000$ km und $T_N = 60\,000$ s die Ausbreitung hydro-

Tabelle 3.6: Vergleich der durchschnittlichen Länge eines Zeitschrittes, der Modelllaufzeit sowie der durchschnittlichen Anzahl an Iterationen des Drucklösers für die drei Testfälle über Trägheitsschwerewellen (Skamarock und Klemp, 1994; Benacchio und Klein, 2019), jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* und *PincFlow mit RK3*.

t_N [s]	x_N [km]	f [s ⁻¹]	Modell	Δt [s]	Laufzeit [s]	Iterationsanzahl
3000	300	0	<i>PincFlow mit SI</i>	44.78	22	65
			<i>PincFlow mit RK3</i>	44.78	18	57
60000	6000	10 ⁻⁴	<i>PincFlow mit SI</i>	895.52	20	57
			<i>PincFlow mit RK3</i>	99.67	66	19
480000	48000	0	<i>PincFlow mit SI</i>	7164.18	21	61
			<i>PincFlow mit RK3</i>	99.73	221	37

statischer Trägheitsschwerewellen betrachtet wird⁷. Andererseits ergibt sich mit $f = 0$, $x_N = 48\,000$ km und $T_N = 480\,000$ s ein Testfall zur Simulation planetarer Schwerewellen. In Abbildung 3.8 ist jeweils das Ergebnis der potentiellen Temperaturstörung zum Zeitpunkt T_N gezeigt. Durch einen qualitativen Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Resultaten von Benacchio und Klein (2019) ist eine insgesamt gute Übereinstimmung zu erkennen, wenn auch in Abbildung 3.8a ein geringfügig höheres Maximum im Zentrum der potentiellen Temperaturstörung zu erkennen ist. Darüber hinaus weist *PincFlow mit SI* für den Testfall planetarer Schwerewellen eine höhere Symmetrie auf.

Zur quantitativen Bewertung der Effizienz⁸ von *PincFlow mit SI* werden nun die Modelllaufzeiten, Längen der Zeitschritte sowie Anzahl der Iterationen des Drucklösers mit den Resultaten von *PincFlow mit RK3* (Tabelle 3.6) verglichen. Die Ergebnisse bestätigen die hohe Effizienz des semi-impliziten Schemas für Simulationen über lange Zeitspannen und große Modelldomänen: Für den betrachteten Testfall planetarer Schwerewellen benötigt *PincFlow mit SI* im Vergleich zu *PincFlow mit RK3* eine bis zu 10-mal kürzere Rechenzeit.

Empirische Konvergenzstudie

Weiterhin werden zur Analyse des numerischen Konvergenzverhaltens⁹ von *PincFlow mit SI* in Abhängigkeit der Zeitschrittweite unterschiedliche Simulationen des oben beschrie-

⁷Analog zu Benacchio und Klein (2019) lautet der Coriolis-Term dabei unter Berücksichtigung eines konstanten Hintergrundwindes $U = 20 \text{ m s}^{-1}$: $f\mathbf{e}_z \times \rho(\mathbf{u} - U\mathbf{e})$.

⁸Wenngleich auch *PincFlow* in der Horizontalen eine parallelisierte Berechnung zulässt, liegt der Fokus dieser Arbeit nicht auf dessen paralleler Effizienz, weshalb das Modell hierbei in serieller Weise verwendet wird.

⁹Im Unterschied zum Testfall des glatten Wirbels (Abschnitt 3.1.1) kann hierbei die Umsetzung der semi-impliziten Zeitintegration des Auftriebs geprüft werden.

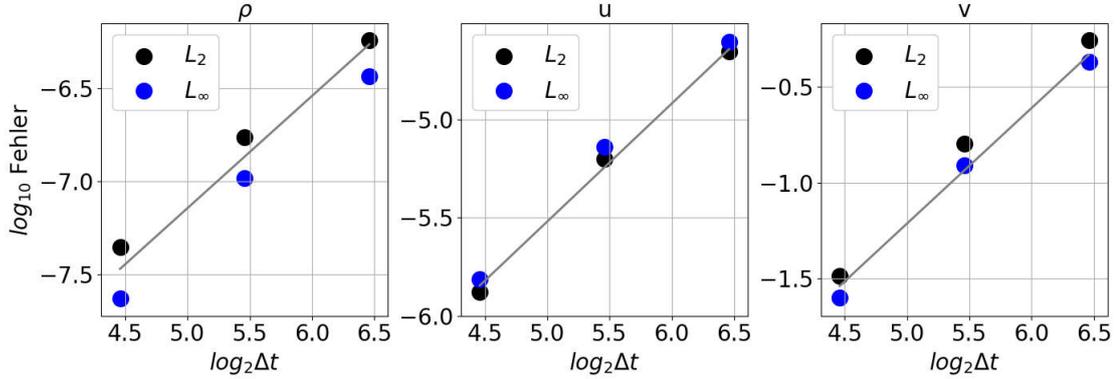


Abbildung 3.9: Dargestellt sind die relativen L_2 und L_∞ Fehler (schwarze und blaue Punkte) der Dichte– (links) sowie u – (mitte) und w – Winde (rechts) zum Zeitpunkt $t = 1$ s in Bezug auf Lösungen von *PincFlow mit SI* unter Anwendung einer konstanten Zeitschrittweite $\Delta t = 11$ s sowie die Konvergenzrate 2 (graue durchgezogene Linie) für den Testfall nicht-hydrostatischer Schwerewellen (Skamarock und Klemp, 1994), jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* und $\Delta t = \text{konst.} = 88$ s, 44 s und 22 s.

benen nicht-hydrostatischen Testfalls ($t_N = 3000$ s, $x_N = 300$ km, $f = 0$) durchgeführt, wobei das Verfahren nun konstante Zeitschrittweiten (jeweils $\Delta t = 88$ s, 44 s und 22 s) verwendet. Analog zu Abschnitt 3.1.1 werden damit die relativen Fehler der prognostischen Felder (ρ , u , w) in Bezug auf das Ergebnis einer Simulation mit $\Delta t = \text{konst.} = 11$ s zum Zeitpunkt $t = 1$ s berechnet. Die Resultate sind in Abbildung 3.9 zusammengefasst und bestätigen das erwartete Konvergenzverhalten zweiter Ordnung für $\Delta t \rightarrow 0$ s.

3.2 Diabatische Testfälle

3.2.1 Kalte Blase

Nachdem im vorherigen Abschnitt Simulationsergebnisse ausschließlich adiabatischer Testfälle betrachtet wurden, wird als nächstes eine fallende kalte Blase (Straka et al., 1993) innerhalb einer neutral geschichteten Atmosphäre, welche sich anfänglich in Ruhe befindet, simuliert¹⁰ (vgl. Fall Nr. 1 in Abschnitt 3.1.2). Hierbei werden die linken Seiten der Impulsgleichungen durch Terme der Form $-\rho\mu\nabla^2\mathbf{v}$ ergänzt und es wird eine schwache Heizung der Form $S = \rho\mu\nabla^2\theta$ implementiert, wobei $\mu = 75 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ist (Straka et al., 1993). Der betrachtete diabatische Testfall bietet somit eine erste Möglichkeit, die Implementierung der Heizung zusammen mit der entsprechenden Dynamik des Hintergrundzustandes zu überprüfen.

Betrachtet wird eine Domäne der Ausdehnung $(x, z) \in [-25.6, 25.6] \times [0, 6.4] \text{ km}^2$ und

¹⁰Die Beschreibung und Ausarbeitung des Testfalls orientiert sich an Benacchio und Klein (2019).

die Blase wird horizontal zentriert durch eine Temperaturstörung der Form

$$T' = \begin{cases} 0 \text{ K}, & \text{falls } r > 1, \\ -7.5 [1 + \cos(\pi r)] \text{ K}, & \text{falls } r < 1 \end{cases} \quad (3.16)$$

mit Radius

$$r^2 = \left(\frac{x}{x_r}\right)^2 + \left(\frac{z - z_c}{z_r}\right)^2 \quad (3.17)$$

initialisiert, wobei $x_r = 4 \text{ km}$, $z_c = 3 \text{ km}$ und $z_r = 2 \text{ km}$ ist. Die Simulationszeit beträgt 900 s und es wird, sofern nicht anders angegeben, eine Auflösung von $\Delta x = \Delta z = 50 \text{ m}$ verwendet. Ferner wird die Größe des Zeitschrittes durch die horizontale Auflösung auf eine maximale Schrittweite von $\Delta t_{max} = 4 \text{ s} \times \Delta x / 50 \text{ m}$ festgesetzt (Benacchio und Klein, 2019) und ansonsten durch das CFL-Kriterium mit $\nu = 0.5$ fortwährend berechnet (Benacchio et al., 2014). Da die Anfangsgeschwindigkeit auf Null gesetzt ist, würden sich ohne Begrenzung der Zeitschrittgröße durch das CFL-Kriterium unendliche große Schrittweiten ergeben. Aufgrund der Symmetrie des Testfalls werden im Folgenden nur Ergebnisse innerhalb der Modelldömäne $[0, 16] \times [0, 5] \text{ km}^2$ gezeigt (Benacchio et al., 2014).

Die Abbildungen 3.10a, c, e, und b zeigen die zeitliche Entwicklung der potentiellen Temperaturstörung. Da eine im Vergleich zum Hintergrundzustand kalte Blase initialisiert wird (a), fällt diese herunter und trifft auf den Boden (c), breitet sich dann entlang des Bodens aus (e) und bildet schließlich Wirbel (b) (Benacchio und Klein, 2019). Zur Gegenüberstellung ist zusätzlich das Ergebnis der potentiellen Temperaturstörung von *PincFlow mit RK3* zum finalen Integrationszeitpunkt abgebildet. Die durchschnittliche Differenz (Abbildung 3.10f) beider Verfahren zum Zeitpunkt $t = 900 \text{ s}$ beträgt $1.7 \times 10^{-5} \text{ K}$ und die entsprechenden relativen L_2 und L_∞ Fehlermaße der potentiellen Temperaturstörung ergeben jeweils 2.5×10^{-3} und 1.3×10^{-3} , sodass sich insgesamt auf eine gute Konformität zwischen den beiden Verfahren schließen lässt.

Darüber hinaus bestätigt die Betrachtung des horizontalen Querschnitts der potentiellen Temperaturstörung in $z = 1200 \text{ m}$ Höhe zum Zeitpunkt $t = 900 \text{ s}$ für fünf verschiedene horizontale Auflösungen (jeweils 400 m , 200 m , 100 m , 50 m und 25 m , vgl. Abbildung 3.11), dass *PincFlow mit SI* mit zunehmender räumlicher Auflösung konvergiert (Benacchio und Klein, 2019). Zu beachten ist hierbei, dass die geringfügige Differenz zwischen den Linien für 50 m und 25 m Auflösung (insbesondere um $x = 13 \text{ km}$) mit hoher Wahrscheinlichkeit auf die verwendete Limiterfunktion (vgl. 2.118) im Advekti-

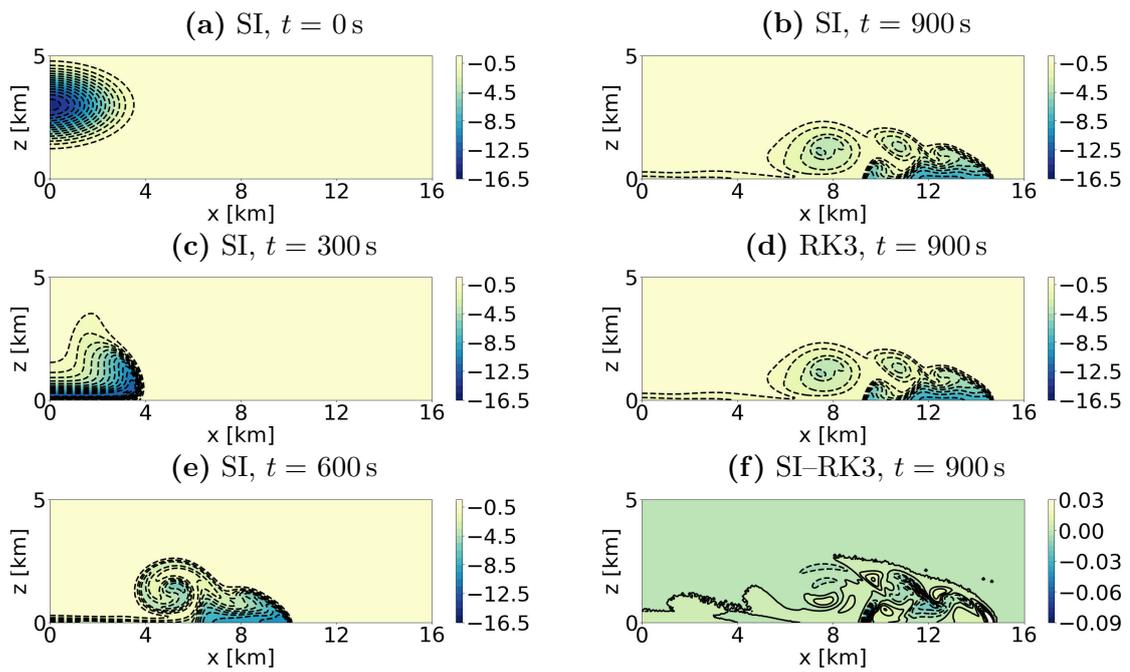


Abbildung 3.10: Gezeigt sind die potentiellen Temperaturstörungen für den Testfall einer kalten Blase von Straka et al. (1993) mit einer räumlichen Auflösung von $\Delta x = \Delta z = 50$ m von *PincFlow* mit *SI* (a–c and e), *PincFlow* mit *RK3* (d) und deren Differenz (f). In (a–e) kennzeichnen die Konturen Temperaturwerte zwischen $[-16.5, 0.5]$ K mit einem Konturintervall von 1 K, während diese in (f) $[-0.09, 0.03]$ K mit einem Konturintervall 0.005 K gegeben sind. Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

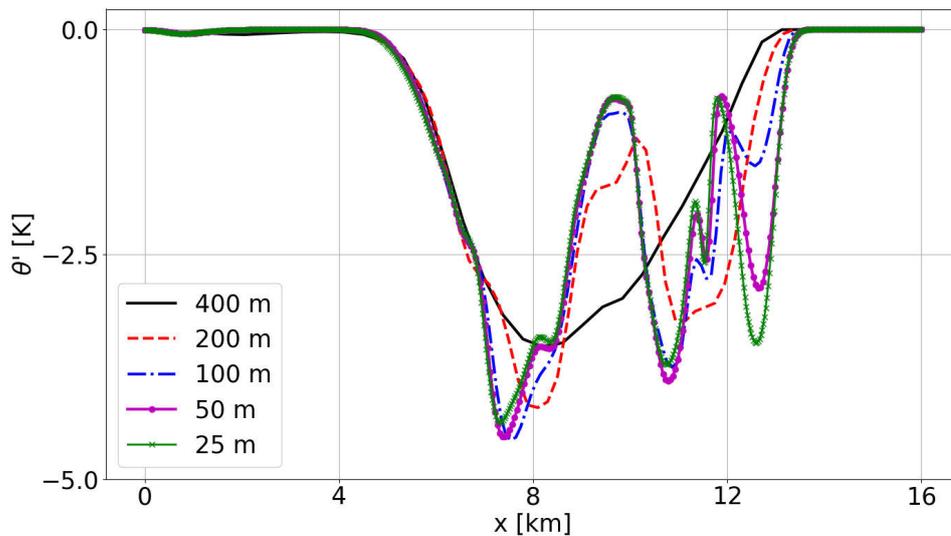


Abbildung 3.11: Horizontaler Querschnitt der potentiellen Temperaturstörung in $z = 1200$ m Höhe zum Integrationszeitpunkt $t = 900$ s der Simulation einer fallenden kalten Blase von *PincFlow mit SI* für die folgenden horizontalen Auflösungen: 400 m (schwarz), 200 m (rot), 100 m (blau), 50 m (magenta) und 25 m (grün).

onnschema zurückgeführt werden kann, welche lediglich lokal die Genauigkeitsordnung des Verfahrens reduziert.

Des Weiteren wird, um die Bedeutung der von der Heizung benötigten zeitlichen Entwicklung der Referenzatmosphäre zu quantifizieren, jeweils die vorderste Position (d.h. die horizontale Lage der 1 K Isolinie der potentiellen Temperaturstörung) sowie die maximale Abweichung der potentiellen Temperatur zum finalen Integrationszeitpunkt $t = 900$ s mit Ergebnissen kompressibler Modelle aus der Literatur verglichen (Abbildung 3.12). Auch wenn der Vergleich zwischen dem in dieser Arbeit verwendeten pseudo-inkompressiblen Modell mit Simulationen kompressibler Verfahren nicht vollkommen adäquat ist, zeigt *PincFlow mit SI* eine recht gute Übereinstimmung, obwohl allgemein eine systematische Unter- bzw. Überschätzung der vordersten Position bzw. potentiellen Temperaturstörung (jeweils um $\approx 6 - 10\%$ für die beiden höchsten gezeigten Auflösungen) durch das pseudo-inkompressible Modell zu erkennen ist.

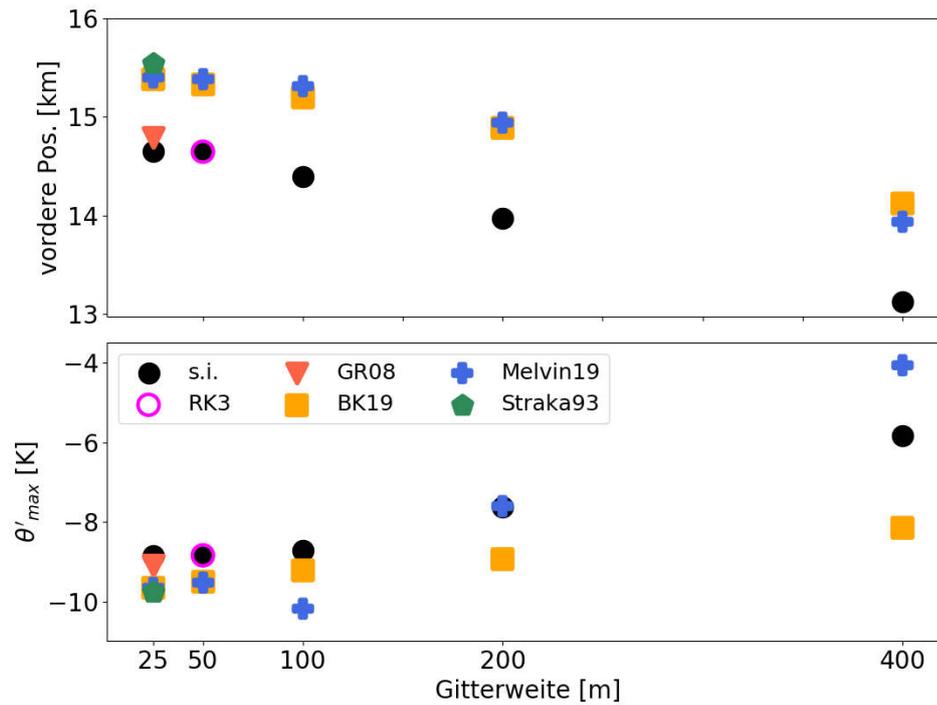


Abbildung 3.12: Gezeigt sind jeweils die vorderste Position (d.h. die horizontale Lage des 1 K-Wertes der potentiellen Temperaturstörung) (obere Abbildung) und die maximale Amplitude der potentiellen Temperaturstörung (untere Abbildung) zum Zeitpunkt $t = 900$ s der Simulationen einer fallenden kalten Blase von *PincFlow mit SI* (schwarz) sowie von *PincFlow mit RK3* (magenta). Außerdem sind Ergebnisse kompressibler Modelle aus der Literatur markiert: Straka et al. (1993) (Straka93, grün), Giraldo und Restelli (2008) (GR08, orange), Benacchio und Klein (2019) (BK19, gelb) und Melvin et al. (2019) (Melvin19, blau).

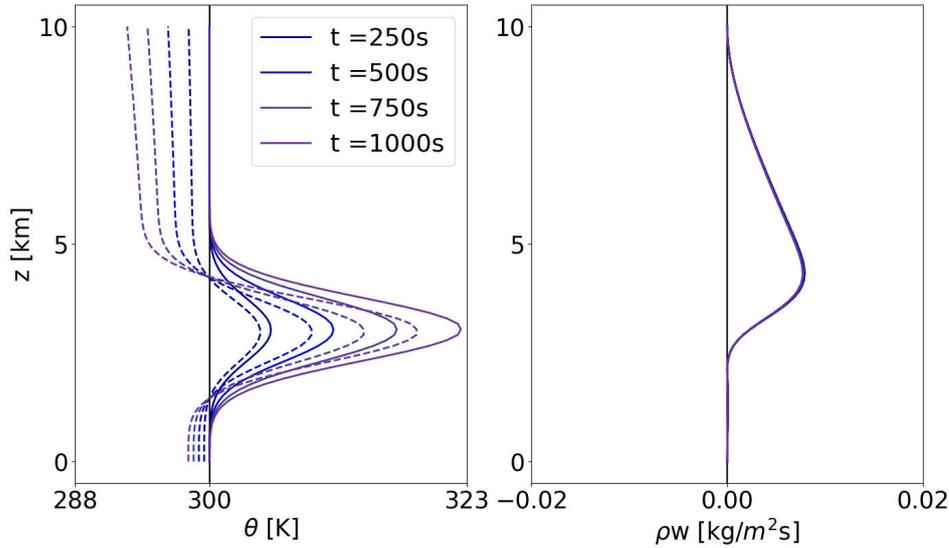


Abbildung 3.13: Es sind die zonal gemittelten potentiellen Temperatur- und vertikalen Impulsprofile zu den Zeitpunkten $t = 250, 500, 750, 1000$ s (farbverlauf von dunkelblau bis violett) für *PincFlow mit SI* inkl. variierenden (durchgezogene Linien) sowie konstantem Hintergrundzustand (gestrichelte Linien) gezeigt.

3.2.2 Heizschicht

Als zweites wird der Einfluss der zeitlichen Entwicklung der Hintergrundatmosphäre in Anwesenheit einer Heizschicht auf die Dynamik einer neutral geschichteten, ruhenden Atmosphäre untersucht¹¹. Es gelten die gleichen Anfangsbedingungen und Modellparameter wie im betrachteten Fall Nr. 1 in Abschnitt 3.1.2, jedoch wird nun über eine Integrationszeit von 1000 s eine Schicht in $z_c = 3$ km Höhe beheizt. Diese hat, ähnlich wie in Almgren et al. (2006), die Form

$$S = S_0 \left\{ \exp \left[-\frac{(z - z_c)^2}{r_0^2} \right] \right\}, \quad (3.18)$$

wobei $r_0 = 1$ km und $S_0 = 0.235 \text{ kg K m}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

Abbildung 3.13 zeigt die zeitliche Entwicklung der zonal gemittelten potentiellen Temperatur- sowie vertikalen Impulsprofile¹², welche jeweils durch *PincFlow mit SI* einschließlich zeitlich variierender Hintergrundatmosphäre, d.h. $\bar{P} \rightarrow \bar{P}(z, t)$, berechnet wurden. Außerdem sind Ergebnisse von *PincFlow mit SI* inklusive zeitlich konstantem Hintergrund ($\partial P / \partial t = 0$) gezeigt.

¹¹Die Struktur des Testfalls basiert auf der Arbeit von Almgren et al. (2006).

¹²Die horizontalen Winde bleiben in diesem Testfall konstant Null.

Im Bereich der beheizten Schicht kann eine zu erwartende Zunahme der potentiellen Temperatur beobachtet werden (Almgren et al., 2006). Außerdem ist die Ausbildung eines entsprechenden Impulsflusses zu erkennen, wobei die Übereinstimmung der vertikalen Impulsflüsse beider Modellläufe so gut ist, dass diese kaum voneinander unterschieden werden können. Im Gegensatz dazu weist ein Vergleich der potentiellen Temperaturprofile signifikante Unterschiede auf. Insbesondere zeigt das Modell mit zeitlich konstantem Hintergrund eine unphysikalische Temperaturabnahme in Regionen oberhalb und unterhalb der Heizschicht, die in den Ergebnissen von *PincFlow* mit zeitabhängigem Hintergrund nicht zu erkennen sind. Dies unterstützt die Erkenntnis von Almgren (2000) und Almgren et al. (2006), dass das pseudo-inkompressible Modell nicht in der Lage ist, die Dynamik diabatischer Prozesse korrekt zu simulieren, solange eine zeitliche Variation der Hintergrundatmosphäre zur Bilanzierung der Heizeffekte (wie beispielsweise thermische Expansion) vernachlässigt wird und bestätigt darüber hinaus die korrekte Implementierung der Heizung in *PincFlow mit SI*.

3.2.3 Lokale Heizblase

Nachdem im letzten Testfall die Dynamik einer horizontal homogen beheizten Schicht simuliert wurde, ist es zusätzlich von Interesse, eine lokale Heizblase¹³ zu betrachten. Die atmosphärische Reaktion wird somit hauptsächlich durch eine stärkere lokale Heizung anstelle einer horizontal gemittelten Erwärmung beeinflusst (Almgren et al., 2006). Es wird der gleiche Atmosphärenzustand wie im vorherigen Testfall 3.2.2 initialisiert (vgl. Fall Nr. 1 in Abschnitt 3.1.2), allerdings wird nun eine horizontal zentrierte Heizung in Form einer Blase, d.h. (vgl. Mendez-Nunez und Carroll, 1994)

$$S = \begin{cases} S_0 \cos^2\left(\frac{\pi}{2}r\right), & \text{falls } r \leq 1, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (3.19)$$

mit

$$r = \left(\frac{x}{r_0}\right)^2 + \left(\frac{z - z_c}{r_0}\right)^2 \quad (3.20)$$

verwendet. Dabei gelten die selben Modellparameter sowie physikalische Parameterwerte wie in Abschnitt 3.2.2, die Heizung wird jedoch bereits nach 250 s abgestellt. Durch den vorliegenden Testfall soll evaluiert werden, dass die Simulationen von *PincFlow mit*

¹³Die Struktur und Analyse des Testfalls orientiert sich an den Arbeiten von Mendez-Nunez und Carroll (1994); Almgren et al. (2006) und Ullrich und Jablonowski (2011).

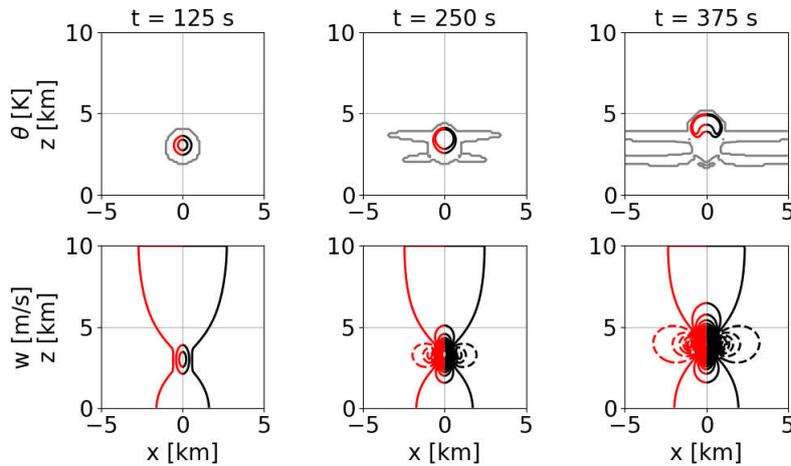


Abbildung 3.14: Gezeigt ist die potentielle Temperatur (obere Zeile) und die vertikale Geschwindigkeit (untere Zeile) zu den Zeitpunkten $t = 125, 250$ und 375 s (von links nach rechts) für *PincFlow mit SI* (schwarz) und *PincFlow mit RK3* (rot). In der oberen Zeile kennzeichnen die Konturen Temperaturwerte zwischen $[300, 302]$ K mit einem Konturintervall von 1 K, wobei die graue Linie die Isentrope für $\theta = 300$ K angibt. In der unteren Zeile sind Geschwindigkeitskonturen zwischen $[-7, 17]$ m s^{-1} mit einem Intervall 1 m s^{-1} gegeben. Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

SI inklusive eines zeitabhängigen Hintergrundzustandes mit Ergebnissen eines expliziten Verfahrens (*PincFlow mit RK3*) kompatibel sind.

Abbildung 3.14 zeigt die zeitliche Entwicklung der potentiellen Temperatur und des vertikalen Geschwindigkeitsfeldes. Die lokale Heizblase verursacht eine positive Auslenkung der potentiellen Temperatur sowie ein vertikales Windfeld, welches die Blase aufwärts transportiert. Darüber hinaus ist nach 375 s eine Deformation der Blase durch Scherung zu erkennen. In Abbildung 3.15 werden zusätzlich die Simulationsergebnisse verschiedener Auflösungen ($\Delta x = \Delta z = 250, 125, 62.5, 31.25$ m) von *PincFlow mit SI* und *PincFlow mit RK3* zum Integrationszeitpunkt 500 s verglichen. Die gewählte konstante Zeitschrittweite wurde dabei proportional zur Auflösung über $\Delta t_{fix} = 1.9 \text{ s} \times \Delta x / 125$ m variiert. Da bei dem betrachteten Testfall keine zusätzlichen Diffusionsterme (vgl. Abschnitt 3.2.1) in die Modellgleichungen implementiert wurden, ist allgemein nicht zu erwarten, dass die Lösung mit zunehmender räumlicher Auflösung konvergiert (Ullrich und Jablonowski, 2011). Allgemein sind in den Ergebnissen der Simulationen mit höheren Auflösungen kleinskaligere Strukturen zu erkennen, wie beispielsweise eine engere Wicklung der seitlichen Enden der deformierten Heizblase, während in den gröber aufgelösten Simulationsergebnissen gitterskalige Oszillationen (vgl. die grauen Isentropen) sichtbar sind (Ullrich und Jablonowski, 2011). Weiterhin zeigt ein Vergleich der

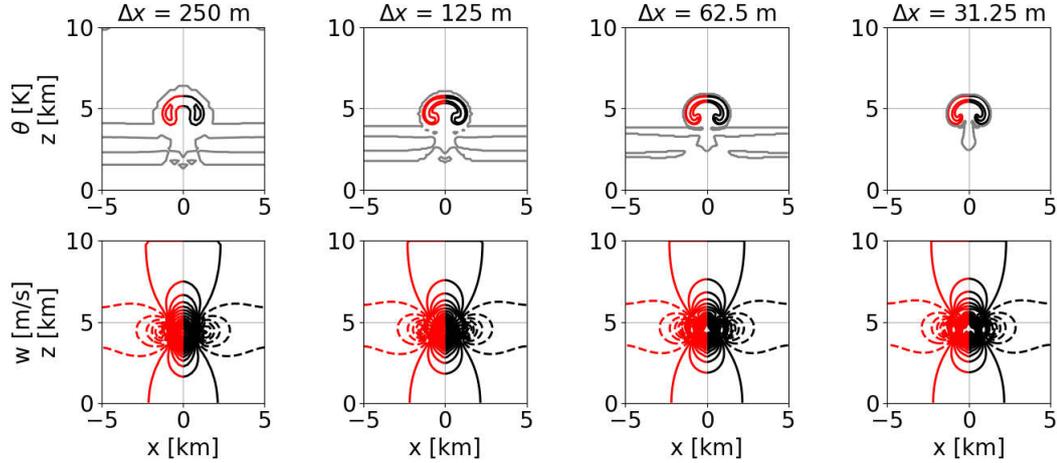


Abbildung 3.15: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung 3.14 zum Integrationszeitpunkt $t = 500$ s für $\Delta x = 250, 125, 62.5, 31.25$ m (von links nach rechts) dargestellt.

Ergebnisse der beiden Zeitschrittverfahren für alle betrachteten Auflösungen eine hervorragende Übereinstimmung, was die Implementierung der Heizung evaluiert.

3.2.4 Heizschicht mit lokaler Heizblase

Abschließend werden, analog zu Almgren et al. (2006), die beiden vorangegangenen Testfälle kombiniert und basierend auf der Studie von Rieper et al. (2013) erweitert, sodass ein realistischerer Atmosphärenzustand simuliert wird. Es wird eine neutral geschichtete Troposphäre mit konstanter potentieller Temperatur $\theta_{tr} = 300$ K und eine isotherme Stratosphäre mit konstanter Temperatur T_{tr} angenommen, welche in $z_{tr} = 12$ km Höhe durch eine Tropopause mit

$$T_{tr} = \theta_{tr} \left(\frac{p_{tr}}{p_{ref}} \right)^{\frac{R}{c_p}} \quad \text{und} \quad p_{tr} = p_{ref} \left(\frac{g z_{tr}}{c_p \theta_{tr}} \right) \quad (3.21)$$

voneinander getrennt werden (Rieper et al., 2013). Das potentielle Temperaturprofil der Stratosphäre ist dabei über

$$\bar{\theta} = \theta_{tr} \exp \left[\frac{g}{c_p T_{tr}} (z - z_{tr}) \right] \quad (3.22)$$

definiert (Rieper et al., 2013). Zur Simulation dieses Testfalls wird eine Domäne der Größe $(x, z) \in [-5, 5] \times [0, 25]$ km², welche auf einem Gitter mit 80×200 Zellen diskretisiert wird, gewählt und die Integration wird bis zum Zeitpunkt $t = 1800$ s durchgeführt.

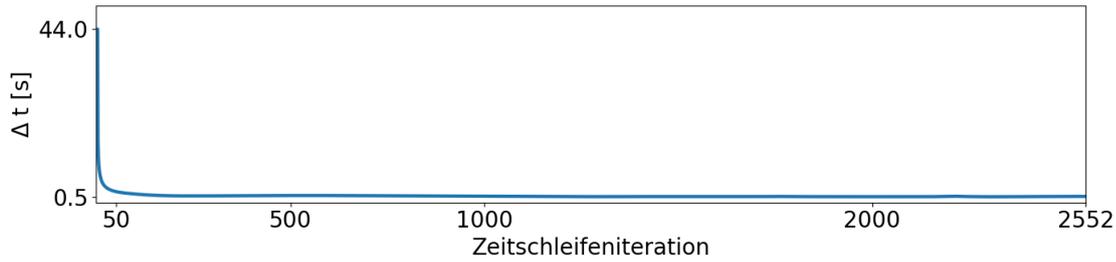


Abbildung 3.16: Gezeigt ist die Zeitschrittweite in Abhängigkeit der Zeitschleifeniteration für den Testfall einer Heizschicht mit lokaler Heizblase für *PincFlow mit SI*.

Ferner wird, ähnlich wie in der Arbeit von Almgren et al. (2006), während der ersten 250 s eine Volumenheizung der Form

$$S = \begin{cases} S_0 \left\{ \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} r \right) + \exp \left[-\frac{(z-z_c)^2}{r_0^2} \right] \right\}, & \text{falls } r \leq 1, \\ S_0 \exp \left[-\frac{(z-z_c)^2}{r_0^2} \right], & \text{falls } r > 1, \end{cases} \quad (3.23)$$

berücksichtigt (vgl. auch die Parameter in 3.19 und 3.18), welche für spätere Zeitpunkte gleich Null gesetzt wird. Da das CFL-Kriterium aufgrund der verschwindenden Anfangsgeschwindigkeit unendlich große Zeitschrittweiten zulassen würde wird ferner

$$\Delta t = \min(\Delta t_{GW}, \Delta t_{CFL}) \quad (3.24)$$

berechnet, wobei $\Delta t_{GW} = 1/N$ die Begrenzung der Zeitschrittweite aufgrund kleinskaliger Oszillationen von Schwerewellen beschreibt (Rieper et al., 2013). Dabei wird $\nu \leq 1/6$ gesetzt¹⁴, sodass sich innerhalb der ersten beiden Integrationsritte Zeitschrittweiten von 44 s ergeben, während am Ende der Integrationszeit $\Delta t \approx 0.56$ s verwendet wird (vgl. Abbildung 3.16). Abbildung 3.17 zeigt Isolinien der potentiellen Temperatur und des vertikalen Impulses zu den Zeitpunkten 600 s, 1200 s und 1800 s Integrationszeit. Aufgrund der Symmetrie des Testfalls zeigen die Diagramme nur Ergebnisse einer Hälfte der Domäne und es sind zusätzlich die Lösungen von *PincFlot mit SI* unter Anwendung einer konstanten Zeitschrittweite $\Delta t = 0.2$ s abgebildet.

Infolge der Heizung ist zu erkennen, wie eine heiße Blase vertikal aufsteigt, sich verformt und an der Tropopause Störungen verursacht, die innerhalb der Stratosphäre (schwere)wellenartig nach oben propagieren (Rieper et al., 2013). Darüber hinaus kann festge-

¹⁴Im Zuge weiterer Untersuchungen dieses Testfalls hat sich ergeben, dass *PincFlow mit SI* mit $\nu \leq 1/6$ die besten Übereinstimmungen mit Ergebnissen des expliziten Modells (*PincFlow mit RK3*) liefert (nicht gezeigt).

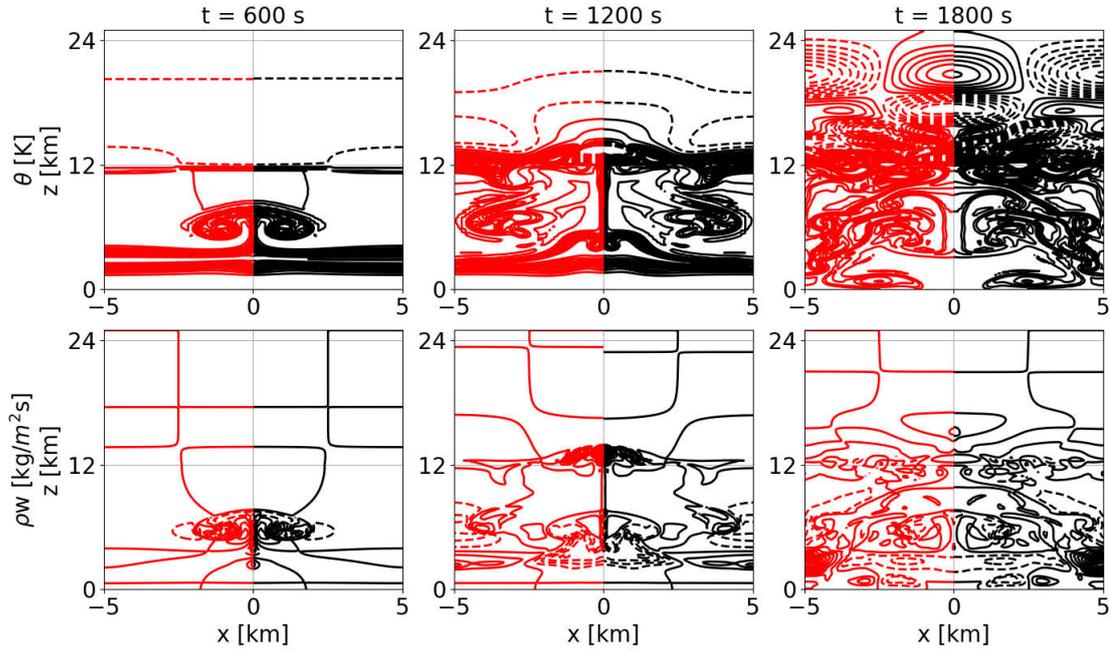


Abbildung 3.17: Gezeigt ist die potentielle Temperatur (obere Zeile) und der vertikale Impuls (untere Zeile) zu den Zeitpunkten $t = 600, 1200$ und 1800 s (von links nach rechts) für *PincFlow mit SI* inkl. variablem Zeitschritt (vgl. 3.24, schwarz) und konstanter Zeitschrittweite ($\Delta t = 0.2$ s, rot). In der oberen Zeile kennzeichnen die Konturen Temperaturwerte zwischen $[-15, 7]$ K mit einem Konturintervall von 1 K. In der unteren Zeile sind Konturen zwischen $[-0.2, 0.32]$ $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$ mit einem Intervall $0.02 \text{ kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$ gegeben. Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

Tabelle 3.7: Maxima und Minima der potentiellen Temperatur und des vertikalen Impulses für den Testfall einer Heizschicht mit lokaler Heizblase zum Zeitpunkt $t = 1800$ s für *PincFlow mit SI* jeweils mit variabler (vgl. 3.24) und konstanter ($\Delta t = 0.2$ s) Zeitschrittweite.

	θ_{max} [K]	θ_{min} [K]	$(\rho w)_{max}$ [$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$]	$(\rho w)_{min}$ [$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$]
$\Delta t \neq \text{konst.}$	9.75	-13.26	0.26	-0.09
$\Delta t = \text{konst.}$	9.34	-12.17	0.27	-0.09

stellt werden, dass die Anwendung von variablen Zeitschrittweiten, welche fortwährend neu berechnet werden, keinen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis haben: Die jeweils gezeigten Domänenhälften stimmen qualitativ, abgesehen von sehr kleinen Diskrepanzen die auf die instabile Natur des Testfalls zurückzuführen sind, exzellent überein, was zusätzlich quantitativ durch Vergleich der Maxima und Minima der abgebildeten Felder in Tabelle 3.7 bestätigt wird.

Kapitel 4

Anwendungstestfall: Idealisierte barokline Lebenszyklen

*Physics has found no straight lines.
Instead, the physical universe consists of only waves
undulating back and forth allowing for corrections and balance.*
– Richard Buckminster Fuller

Die primäre Motivation zur Entwicklung des semi-impliziten Finite-Volumen-Modells, welches im vorherigen Kapitel anhand einer Reihe atmosphärischer Standardtestfälle umfangreich validiert wurde, war effizient die Dynamik interner Schwerewellen sowie deren Einfluss auf die Zirkulation der mittleren Atmosphäre modellieren zu können. Infolgedessen wird in diesem Kapitel als erster drei-dimensionaler Anwendungstestfall von *PincFlow* eine relativ grob aufgelöste Simulation idealisierter barokliner Wellenaktivität in der Troposphäre durchgeführt, welche die grundlegende Entwicklung der atmosphärischen, synoptischskaligen Strömung in den mittleren Breiten widerspiegeln soll und die darin enthaltene kleinskalige Wellenaktivität sowie deren Ausbreitung in die mittlere Atmosphäre modelliert¹.

Die Modellierung erfolgt in zwei Schritten. In Abschnitt 4.1 wird zunächst, basierend auf der Arbeit von Held und Suarez (1994), eine stationäre, rein zonale geostrophisch balancierte Jetströmung initialisiert (vgl. Abschnitt 2.4.3) und über einen Zeitraum

¹Allgemein ist zu beachten, dass anhand der durchgeführten Simulation lediglich die konzeptionelle Anwendbarkeit von *PincFlow* zur idealisierten Modellierung atmosphärischer Schwerewellenaktivität verdeutlicht werden soll, während weitere Anpassungen der Modellkonfiguration, Modellläufe mit höherer Auflösung sowie eine entsprechende Analyse der Dynamik zukünftigen Studien vorbehalten sind.

von einer Woche integriert. Die Konfiguration dient zur Validierung der in dieser Arbeit verwendeten Strategie zur Gewährleistung grundlegender Gleichgewichte (vgl. Abschnitt 2.4.5 und Anhang A). Im Anschluss daran wird in Abschnitt 4.2 aus dem anfänglich balancierten Zustand durch eine schwache Temperaturstörung ein baroklin instabiles Strömungsprofil angeregt (vgl. Kühnlein et al., 2012; Schemm et al., 2013) und die Dynamik troposphärischer, barokliner Wellen mit Hilfe eines Relaxationsansatzes als Wärmequelle (vgl. Abschnitt 2.4.4 und Held und Suarez, 1994; Hien et al., 2018) sowie die daraus hervorgehende kleinskalige Wellenaktivität über 120 Tage modelliert.

4.1 Stationarität des Gleichgewichtszustandes

4.1.1 Modellkonfiguration

Bevor die Ergebnisse der Simulationen vorgestellt werden, soll hier noch kurz auf die verwendete Modellkonfiguration eingegangen werden. *PincFlow* verwendet eine dreidimensionale Modelldomäne der Ausdehnung $(x, y, z) \in [0, L_x] \times [-L_y/2, L_y/2] \times [0, H]$, innerhalb welcher der in Abschnitt 2.4.3 beschriebene, analytisch balancierte Gleichgewichtszustand initialisiert wird. Die anfänglichen Hintergrundfelder werden dabei über das horizontale Mittel der anfänglichen Temperatur berechnet, d.h. es gilt $\bar{T}(t_0) = \langle T_{eq} \rangle$ und $d\bar{\pi}(t_0)/dz = -g/c_p\bar{\theta}(t_0)$ mit $\bar{\theta}(t_0) = \bar{T}(t_0)/\bar{\pi}(t_0)$ (vgl. Abschnitt 2.4.3). Alle weiteren gesetzten Parameterwerte sind in Tabelle 2.1 zu finden².

Zu beachten ist, dass hierbei, im Unterschied zum vorherigen Kapitel 3, im Folgenden der in Abschnitt 2.4.3 vorgestellte analytisch balancierte Gleichgewichtszustand (vgl. auch Abschnitt A) sowie die Rayleigh-Dämpfung der Geschwindigkeitsfelder (vgl. 2.40) und Heizung (vgl. 2.48) in den Modellgleichungen berücksichtigt werden. Ferner wird keine Limiterfunktion innerhalb des Advektionsschemas verwendet und es wird in ähnlicher Weise wie in der Arbeit von Held und Suarez (1994) zur Filterung unphysikalischer, gitterskaliger Oszillationen ein Shapiro-Filter (Shapiro, 1970) achter Ordnung in zonaler und meridionaler Richtung genutzt. Insbesondere wird dieser auf die Abweichungen der prognostizierten Felder vom vordefinierten Gleichgewichtszustand, d.h. $[\rho - \rho_{eq}]$, $[\rho' - \rho_{eq} + \bar{\rho}(t_0)]$, $[\mathbf{v} - \mathbf{v}_{eq}]$, angewendet. Eine genauere Erläuterung des implementierten Shapiro-Verfahrens ist in Anhang C zu finden, während dessen Funktionsweise in Anhang D anhand des Testfalls eines brechenden Schwerewellenpakets näher beleuchtet wird.

²Für die in Abschnitt 4.1.2 gezeigten Ergebnisse ist exemplarisch eine Dämpfungskonstante von $\alpha_{max} = 2$ gesetzt.

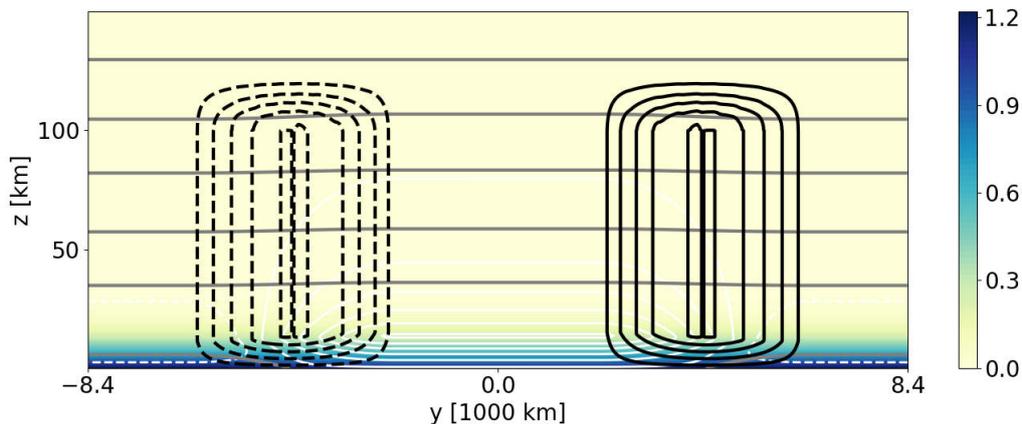


Abbildung 4.1: Anfängliche, zonal gemittelte Dichte (farbig, $[\text{kg m}^{-3}]$), zonale Windgeschwindigkeit (schwarze Konturen zwischen $[-45, 45] \text{ m s}^{-1}$ mit einem Konturintervall von 10 m s^{-1}), potentielle Temperatur (graue Konturen im Bereich zwischen $[3 \times 10^2, 10^5] \text{ K}$) und Fluktuationen des Exnerdrucks (weiße Konturen zwischen $[0.009, 0.026]$ mit einem Konturintervall von 0.005) für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen. Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

4.1.2 Ergebnisse

Der stationäre, dreidimensionale Gleichgewichtszustand wird über eine Integrationszeit von 604800 s ($= 7$ Tage) simuliert, wobei im Idealfall erwartet wird, dass das Modell den Anfangszustand über den betrachteten Zeitraum beibehält (Jablonowski und Williamson, 2006). Es werden vier Simulationen mit jeweils unterschiedlichen horizontalen Auflösungen ($\Delta x = \Delta y = 200 \text{ m}$, 100 m , 50 m und 25 m) und $N_z = 150$ vertikale Gitterpunkte durchgeführt, wobei zur Berechnung der zeitlichen Auflösung $\nu = 1/6$ gesetzt ist.

Die anfänglichen, zonal gemittelten Felder der Dichte ρ_{eq} , der zonalen Windkomponente u_{eq} , der potentiellen Temperatur θ_{eq} sowie der Fluktuationen des Exnerdrucks π'_{eq} sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Die thermodynamischen Felder weisen dabei aufgrund der periodische Randbedingungen in den beiden horizontalen Raumrichtungen eine Symmetrie bezüglich des meridionalen Zentrums der Domäne auf, wobei jeweils im Bereich von $\pm L_y/4$ eine barokline Zone in den unteren Schichten zu erkennen ist³. Folglich zeigt das zonale Windfeld zwei Zonaljets mit entgegengesetzten Windrichtungen, welche das geostrophische und hydrostatische Gleichgewicht (vgl. auch 2.47) erfüllen und eine absolute maximale zonale Windgeschwindigkeit von etwa 46 m s^{-1} in $z \approx 11 \text{ km}$ Höhe aufweisen.

³Oberhalb der Troposphäre ist die anfängliche Strömung barotrop.

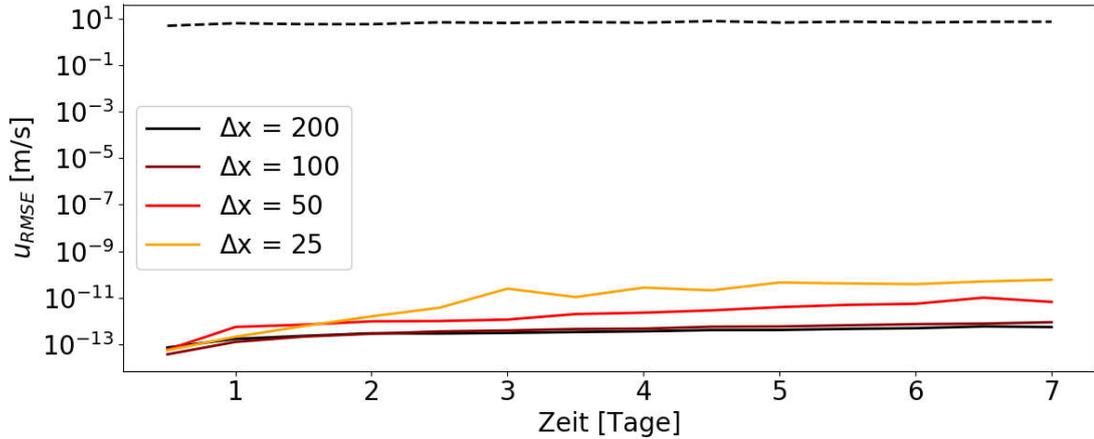


Abbildung 4.2: Zeitlicher Verlauf von u_{RMSE} (vgl. 4.1) für den Testfall eines stationären Gleichgewichtszustandes für die folgenden horizontalen Auflösungen: 200 m (schwarz), 100 m (braun), 50 m (rot) und 25 m (gelb). Die durchgezogenen Linien zeigen Ergebnisse von *PincFlow mit SI* inkl. Subtraktion des anfänglichen Gleichgewichtszustandes in den prognostischen Gleichungen (vgl. 2.92), während die gestrichelte Linie Ergebnisse einer Simulation mit $\hat{\psi} = \psi$ in (2.92) abbildet.

Als nächstes ist zur quantitativen Überprüfung der Stationarität von *PincFlow* bezüglich des oben dargestellten, anfänglichen Gleichgewichtszustandes der zeitliche Verlauf von

$$u_{RMSE} = \sqrt{\langle [u_{eq} - u(t)]^2 \rangle} \quad (4.1)$$

in Abbildung 4.2 dargestellt. Um darüber hinaus die Notwendigkeit der Subtraktion eines vordefinierten Gleichgewichtszustandes (vgl. Abschnitt 2.4.5 und Anhang A) deutlicher zu skizzieren und die Auswirkungen auf die Ergebnisse von *PincFlow* zu beleuchten, wenn diese Methodik vernachlässigt wird, sind außerdem Ergebnisse einer Simulation mit $\Delta x = \Delta y = 200$ m und $\Delta z = 1$ km gezeigt, bei der in (2.92) $\hat{\psi} = \psi$ gilt.

Während die Ergebnisse der Simulationen, bei denen eine Subtraktion des anfänglichen Gleichgewichtszustandes in den prognostischen Gleichungen berücksichtigt wird (vgl. 2.92), Werte im Bereich von Größenordnungen kleiner $\mathcal{O}(10^{-9} \text{ m s}^{-1})$ aufweisen und somit die Stationarität von *PincFlow* bestätigen, zeigen die Ergebnisse der Simulation mit $\hat{\psi} = \psi$ in (2.92) ein deutlich größeres Fehlermaß von $u_{RMSE} \approx 10 \text{ m s}^{-1}$. Eine nähere Betrachtung der prognostizierten Geschwindigkeitsfelder ergibt außerdem, dass insbesondere das vertikale Geschwindigkeitsfeld im letzteren Fall bereits nach kurzer Zeit unphysikalische, gitterskalige Störungen (vorwiegend im Bereich der baroklinen Zone in Höhe der Tropopause) mit Amplituden von etwa 0.001 m s^{-1} entwickelt, welche

weiterhin kleinskalige, wellenartige Strukturen in größere Höhen abstrahlen (nicht gezeigt). Diese haben einen Einfluss auf die Dynamik der Strömung und erklären somit die signifikante Abweichung vom anfänglichen Zustand. Im Unterschied dazu bleibt im Fall ersterer Simulationen (inkl. Subtraktion des anfänglichen Gleichgewichtszustandes in den prognostischen Gleichungen) $w < 10^{-9} \text{ m s}^{-1}$ für die betrachtete Integrationszeit (nicht gezeigt). Zusammengefasst bestätigen die betrachteten Ergebnisse die Funktionsweise der angewandten Strategie zur Gewährleistung grundlegender Gleichgewichte in *PincFlow*.

4.2 Idealisierte barokline Lebenszyklen

Nachdem die Stationarität von *PincFlow* bezüglich des vordefinierten Gleichgewichtszustandes Gegenstand des vorherigen Abschnittes war, wird nun die Dynamik troposphärischer, barokliner Wellen und insbesondere die daraus hervorgehende kleinskalige Wellenaktivität betrachtet. Zunächst wird ein Überblick über die zeitliche Entwicklung der Strömung gegeben, wobei insbesondere die gefilterte horizontale Geschwindigkeitsdivergenz zur Detektion der kleinskaligen Wellenaktivität (z.B. O’Sullivan und Dunkerton, 1995; Polichtchouk und Scott, 2020) dient. Anschließend wird der Einfluss des semi-impliziten Zeitintegrationsverfahrens auf die kleinskaligen Wellen untersucht. Schließlich wird die Klimatologie der zonal gemittelten Felder gezeigt und der Effekt der kleinskaligen Wellen skizziert.

4.2.1 Modellkonfiguration

Der Anfangszustand entspricht der Modellkonfiguration⁴ des vorherigen Abschnittes 4.1.1. Allerdings wird zusätzlich zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ s}$, basierend auf den Arbeiten von Kühnlein et al. (2012) und Schemm et al. (2013), jeweils im zonalen und meridionalen Zentrum der Jets der nördlichen bzw. südlichen Hemisphäre in Höhe der Tropopause (d.h. $(x, y, z) = (L_x/2, \pm L_y/2, z_{tr})$) eine schwache positive bzw. negative Störung der Form

$$\theta' = \begin{cases} \pm \delta \theta \cos^2(0.5\pi r), & \text{falls } r \leq 1, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.2)$$

⁴Zur vereinfachten Beschreibung wird in den nachfolgenden Abschnitten die Hälfte der Modelldomäne, für welche $y > 0 \text{ km}$ gilt (und zu Beginn der Simulation $u > 0 \text{ m s}^{-1}$ aufweist) als nördliche Hemisphäre bezeichnet, während die negative meridionale Hälfte als südliche Hemisphäre benannt wird.

auf das potentielle Temperaturfeld addiert, wobei $\delta\theta = 0.3\text{ K}$ und

$$r = \left(\left[\frac{(x - L_x/2)}{\delta x} \right]^2 + \left[\frac{(y - L_y/2)}{\delta y} \right]^2 + \left[\frac{(z - z_{tr})}{\delta z} \right]^2 \right)^{1/2}, \quad (4.3)$$

mit $\delta x = \delta y = 10\text{ km}$ und $\delta z = 4\text{ km}$ ist. Durch diese wird die Entwicklung eines baroklin instabilen Strömungsprofils initiiert. Ferner wird die großskalige, barokline Wellenstruktur mit Hilfe eines Relaxationsansatzes als Wärmequelle (vgl. Abschnitt 2.4.4 und Held und Suarez, 1994; Hien et al., 2018) modelliert. Insbesondere gewährleistet die gewählte zonale Ausdehnung der Simulationsdomäne (vgl. Tabelle 2.1), dass sie auf beiden Hemisphären jeweils genau eine Wellenlänge der baroklinen Wellen enthält (Hien et al., 2018). Darüber hinaus stellen die verwendeten doppeltperiodischen horizontalen Randbedingungen (siehe Abschnitt 2.4.4) sicher, dass ausschließlich die interne Strömung als Antrieb von Schwerewellen in Frage kommt (Hien et al., 2018).

Die Simulation wird über eine Integrationszeit von $10\,368\,000\text{ s}$ ($= 120$ Tage) durchgeführt, sodass wiederholte barokline Lebenszyklen in der Troposphäre modelliert werden und der Einfluss der kleinskaligen Wellenaktivität auf die Dynamik der mittleren Atmosphäre ausreichend Zeit hat sich zu auszubilden. Die horizontale Auflösung beträgt dabei $\Delta x = \Delta y = 50\text{ km}$ und in der Vertikalen werden $N_z = 300$ Gitterpunkte gesetzt. Außerdem gilt $\nu = 1/6$, woraus eine mittlere Zeitschrittweite von $\Delta t \approx 111\text{ s}$ resultiert.

4.2.2 Ergebnisse

Barokline und kleinskalige Wellenaktivität

In Abbildung 4.3 ist beispielhaft ein Überblick über die Ergebnisse der potentiellen Temperatur in $z = 250\text{ m}$ Höhe sowie des horizontalen Windfeldes in der Höhe z_{tr} nach jeweils 60, 66, 72, 78, 84 und 90 Tagen in der nördlichen Hemisphäre dargestellt. Darüber hinaus ist die gefilterte horizontale Geschwindigkeitsdivergenz⁵ in der Höhe z_{tr} abgebildet. Insbesondere soll durch das potentielle Temperaturfeld die Struktur der baroklinen Wellen verdeutlicht werden, während die gefilterte horizontale Geschwindigkeitsdivergenz zur Detektion der emittierten kleinskaligen Wellenpakete (z.B. O’Sullivan und Dunkerton, 1995; Polichtchouk und Scott, 2020) dient.

Die Ergebnisse des bodennahen potentiellen Temperaturfeldes zeigen exemplarisch nach einer Integrationszeit von 60 Tagen (Abbildung 4.3a) eine anwachsende barokline Welle, welche ihren Kipppunkt erreicht (Tag 66, Abbildung 4.3b) und anschließend wieder

⁵Es wird ein horizontaler Fourierfilter auf $\nabla_h \cdot \mathbf{u}$ angewendet, welcher Wellenlängen, die länger als 1000 km sind, herausfiltert.

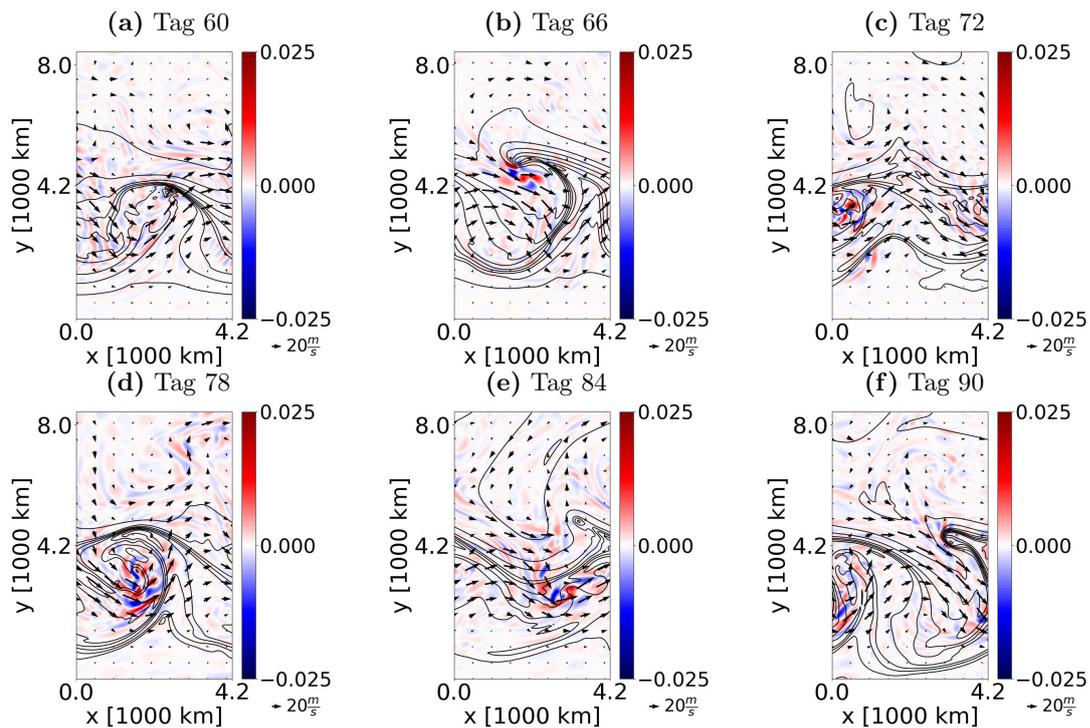


Abbildung 4.3: Horizontaler Querschnitt der potentiellen Temperatur [K] in $z = 250$ m Höhe (schwarze Konturen), horizontales Geschwindigkeitsfeld [m s^{-1}] in $z = 11.25$ km Höhe (Pfeile) und die gefilterte horizontale Geschwindigkeitsdivergenz [s^{-1}] in $z = 11.25$ km Höhe (farbig) jeweils um 00:00 UTC an Tag 60, 66, 72, 78, 84 und 90. Das Konturintervall der Isentropen beträgt jeweils 3 K.

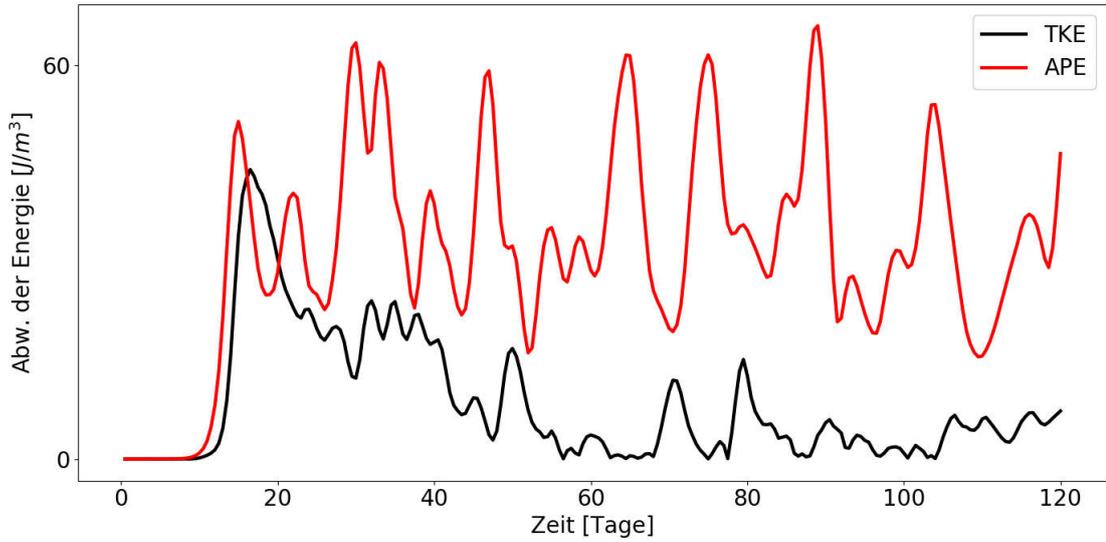


Abbildung 4.4: Zeitlicher Verlauf der Abweichung der TKE (schwarz, vgl. 4.4) und APE (rot, vgl. 4.5) innerhalb der Troposphäre der nördlichen Hemisphäre in Bezug auf ihre Werte zum Zeitpunkt $t = 0$ s.

abflacht (Tag 72, Abbildung 4.3c), bevor sie sich erneut auftürmt. Analog dazu zeigen die Abbildungen 4.3d - 4.3f wiederholt eine Intensivierung, anschließendes Abklingen sowie ein erneutes Anwachsen der baroklinen Welle. Das horizontale Geschwindigkeitsfeld ist allgemein in zonaler Richtung ausgerichtet und weist eine Scherung des Zonalwindes nördlich der baroklinen Welle auf. Darüber hinaus können durch die Querschnitte der gefilterten Divergenz des Horizontalwindes kleinskalige Wellensignale beobachtet werden, die höchstwahrscheinlich Schwerewellenpaketen zugeordnet werden können.

Zur weiteren Charakterisierung der simulierten Strömungseigenschaften (insbesondere des zeitlichen Verlaufs der baroklinen Wellenaktivität) werden im Folgenden die Zeitreihen der räumlich gemittelten Werte der Abweichung der kinetischen Energie (engl.: *total kinetic energy*, *TKE*) und der verfügbaren potentiellen Energie (engl.: *available potential energy*, *APE*) der Grundströmung, d.h. (vgl. z.B. Lorenz, 1955)

$$\text{TKE} = \frac{2}{L_x L_y z_{tr}} \int_0^{z_{tr}} dz \int_0^{L_y/2} dy \int_0^{L_x} dx \frac{\bar{\rho}}{2} \|\mathbf{v}\|^2, \quad (4.4)$$

$$\text{APE} = \frac{2}{L_x L_y z_{tr}} \int_0^{z_{tr}} dz \int_0^{L_y/2} dy \int_0^{L_x} dx \frac{\bar{\rho}}{2N^2} b^2, \quad (4.5)$$

innerhalb der Troposphäre der nördlichen Hemisphäre in Bezug auf ihre Werte zum Zeitpunkt $t = 0$ s betrachtet. Die berechneten Zeitreihen sind in Abbildung 4.4 dargestellt.

Tabelle 4.1: Vergleich der durchschnittlichen Länge eines Zeitschrittes und der durchschnittlichen Anzahl an Iterationen des Drucklösers für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen, jeweils simuliert mit *PincFlow mit SI* mit variablen, langen Zeitschrittweiten, *PincFlow mit SI* mit konstanten, kurzen Zeitschrittweiten und *PincFlow mit RK3*.

Modell	$\Delta t[s]$	Iterationsanzahl
<i>PincFlow mit SI</i>	140.26	74
<i>PincFlow mit SI</i>	2.28 (= const.)	120
<i>PincFlow mit RK3</i>	2.28	6.3

Ein Anstieg der verfügbaren potentiellen Energie kann mit dem Amplitudenwachstum der baroklinen Welle verknüpft werden, deren Anwachsen etwa nach 7 Tagen beginnt. Die verfügbare potentielle Energie wird anschließend in kinetische Energie der baroklinen Welle umgewandelt. Allgemein ist eine periodische Folge von Maxima und Minima (Hien, 2018) der verfügbaren potentiellen Energie zu erkennen. Die kinetische Energie zeigt eine ähnliche, jedoch deutlich geringer ausgeprägte Abfolge von Minima und Maxima, wobei bis Tag 60 allgemein eine Abnahme zu erkennen ist, sodass die Maxima immer kleiner werden (vgl. Hien, 2018). Danach nimmt die kinetische Energie einen Gleichgewichtszustand an, während für die verfügbare potentielle Energie weiterhin ein wiederholtes Anwachsen und Abklingen der baroklinen Wellenaktivität in der Troposphäre beobachtet werden kann.

Als nächstes lohnt es sich, den Einfluss des semi-impliziten Zeitschrittverfahrens (mit variablen, langen Zeitschrittweiten) auf die kleinskaligen Strömungseigenschaften zu untersuchen. Dazu wird ein qualitativer Vergleich der kleinskaligen Wellen, welche anfänglich durch die geostrophische Anpassung an die potentielle Temperaturstörung erzeugt werden, mit dem Ergebnis von *PincFlow mit SI* unter Anwendung konstanter, kurzer Zeitschrittweiten sowie einer Simulation von *PincFlow mit RK3* vorgenommen. Eine Übersicht über die durchschnittliche Länge der verwendeten Zeitschrittweiten sowie Anzahl an Iterationen des Drucklösers ist in Tabelle 4.1 zusammengefasst, während Abbildung 4.5 jeweils das zonal gemittelte vertikale Geschwindigkeitsfeld zum Zeitpunkt $t = 2.5$ h zeigt. Allgemein weisen die dargestellten Felder für die unterschiedlichen Simulationen eine ähnliche Wellenstruktur auf und zeigen insbesondere in der Troposphäre sowie in Höhen, die deutlich unterhalb der Schwammschicht liegen, eine hervorragende Übereinstimmung. Die geringen Unterschiede direkt unterhalb der Schwammschicht, die bei genauerer Betrachtung auffallen, können höchstwahrscheinlich auf die Stärke der Dämpfung der Schwammschicht zurückgeführt werden, welche invers proportional zu der

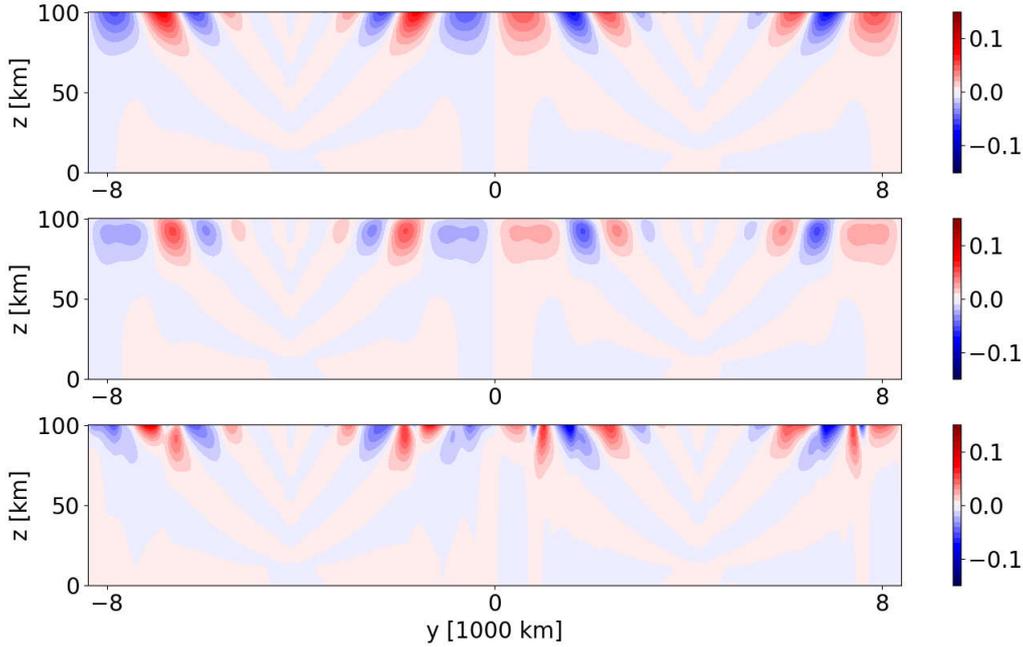


Abbildung 4.5: Gezeigt ist das zonal gemittelte vertikale Geschwindigkeitsfeld zum Zeitpunkt $t = 2.5$ h für *PincFlow* mit *SI* inkl. variablem Zeitschritt (obere Abbildung) und konstanter Zeitschrittweite ($\Delta t = 2.28$ s, mittlere Abbildung) sowie für *PincFlow* mit *RK3* (untere Abbildung). Die Einheit ist m s^{-1} .

Zeitschrittweite skaliert und so einen nicht unbedeutenden Einfluss auf das Wellensignal haben kann.

Zonal gemittelte Strömung

Zur weiteren Auswertung der groß- und kleinskaligen Strömungseigenschaften des vorliegenden Anwendungstestfalls barokliner Instabilität, ist in Abbildung 4.6 beispielhaft der vertikale Querschnitt (bei $x = 2100$ km) der Abweichung des Vertikalwindes von dessen zonalem Mittelwert zum finalen Integrationszeitpunkt (Tag 120) dargestellt. Die Abweichung des zonal gemittelten vertikalen Geschwindigkeitsfeldes zeigt in den höheren Lagen ($z > 50$ km) vorwiegend kleinskalige, wellenartige Strukturen mit $\max |w'| \approx 0.3 \text{ m s}^{-1}$. Darüber hinaus deutet eine Zerlegung (mit Hilfe eines Fourierfilters) des dargestellten vertikalen Geschwindigkeitsfeldes in einen großskaligen Anteil (durch eines Überstrich mit hochgestelltem Index f gekennzeichnet) mit horizontalen Wellenlängen, die größer als 1000 km sind, und eine kleinskalige Abweichung (durch $\hat{\cdot}$ markiert) davon, d.h.

$$w' = \overline{w'}^f + \hat{w}', \quad (4.6)$$

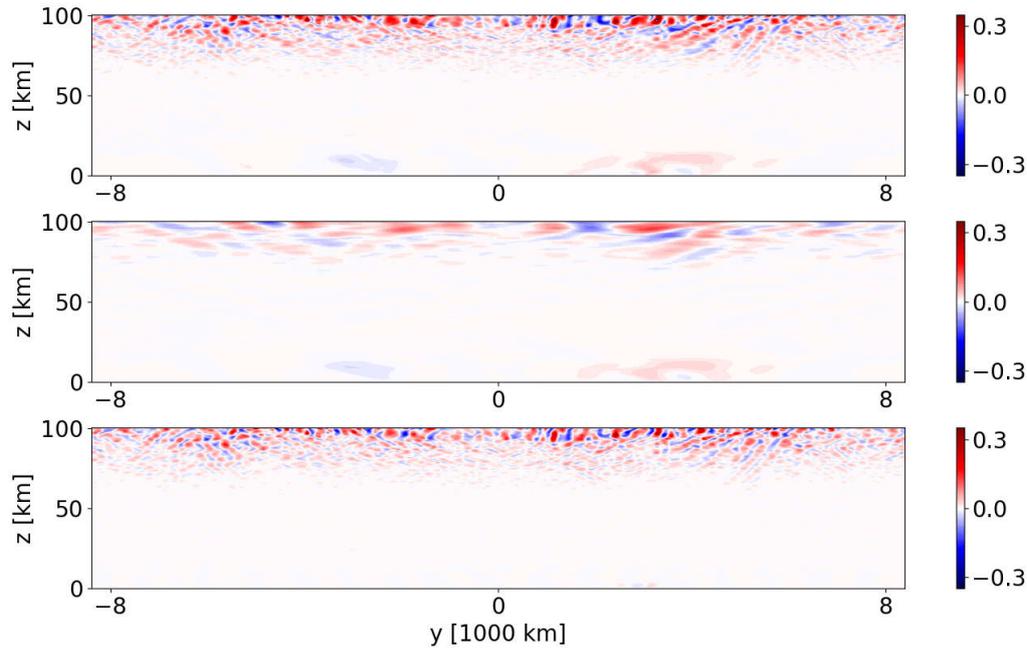


Abbildung 4.6: Gezeigt ist der vertikale Querschnitt bei $x = 2100$ km von $w' = w - \langle w \rangle$ (obere Abbildung), $\overline{w'}^f$ und \hat{w}' (vgl. 4.6, untere und mittlere Abbildung) an Tag 120 um 00:00 UTC. Die Einheit ist m s^{-1} .

darauf hin, dass ein Großteil der Fluktuationen höchstwahrscheinlich auf kleinskalige, interne (Schwere-)Wellen zurückgeführt werden können, welche im Bereich der baroklinen Welle in der Troposphäre emittiert wurden und anschließend aufwärts propagiert sind (vgl. Abbildung 4.6). Der verbleibende großskalige Anteil ist hierbei zwar von vergleichbarer Größenordnung wie die kleinskaligen Wellen, kann jedoch mit großer Wahrscheinlichkeit durch die mesoskalige Modellauflösung erklärt werden, welche im betrachteten Testfall allgemein zu grob gewählt ist um Schwerewelleneffekte ausreichend aufzulösen. Möglicherweise könnten daher die Effekte kleinskaliger Wellen in Simulationen mit höheren Auflösungen eine vergleichsweise größere Rolle spielen. Darüber hinaus könnte eine lokale barokline Instabilität im Bereich der Jets in der Höhe ebenfalls zu dem großskaligen Anteil beitragen.

Als nächstes sind in Abbildung 4.7 die zonal und zeitlich gemittelten Felder⁶ $[u]$ und $[g/(c_p \bar{\theta}) \theta' / \bar{\theta}]$ gezeigt. Diese erfüllen in guter Näherung das geostrophische und hydrostatische Gleichgewicht für die Fluktuationen des Exnerdrucks (vgl. z.B. Achatz et al., 2017)

⁶Die zeitliche und zonale Mittelung der Felder über die letzten 60 Tage der Simulation wird im Folgenden durch die eckigen Klammern $[]$ gekennzeichnet.

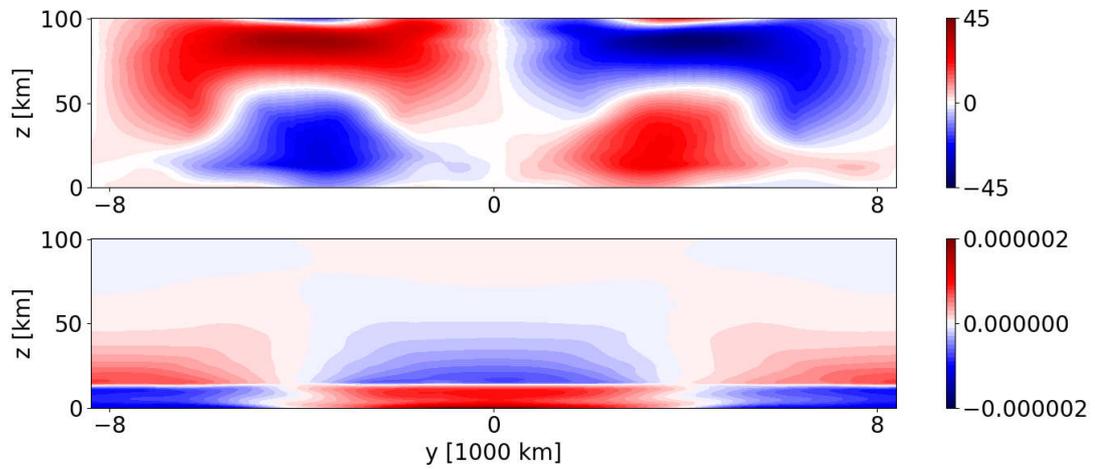


Abbildung 4.7: Es sind die zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelten Felder $[u]$ (obere Abbildung, $[\text{m s}^{-1}]$) und $[g(c_p\bar{\theta})^{-1}\theta'/\bar{\theta}]$ (untere Abbildung, $[\text{m}^{-1}]$) dargestellt.

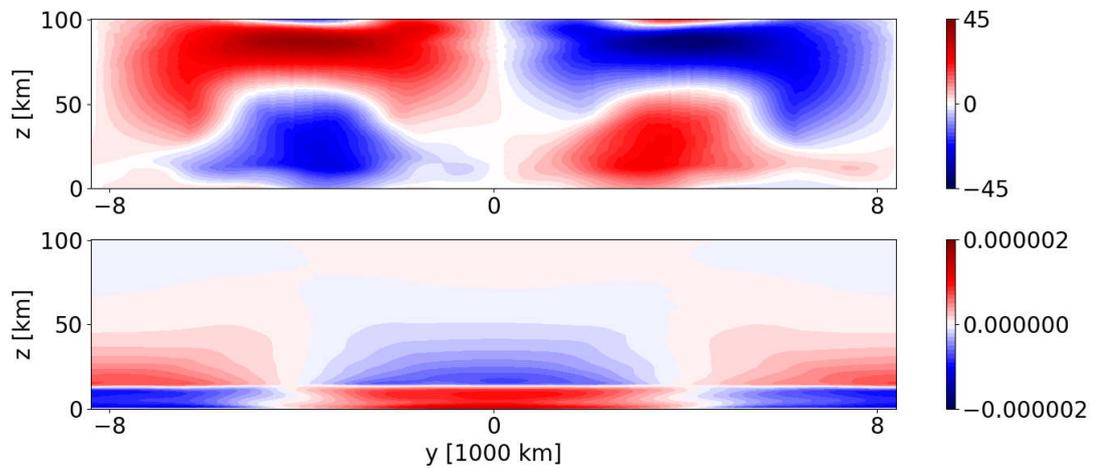


Abbildung 4.8: Es sind die zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelten Felder $[c_p\bar{\theta}/f \partial\pi'/\partial y]$ (obere Abbildung, $[\text{m s}^{-1}]$) und $[\partial\pi'/\partial z]$ (untere Abbildung, $[\text{m}^{-1}]$) dargestellt.

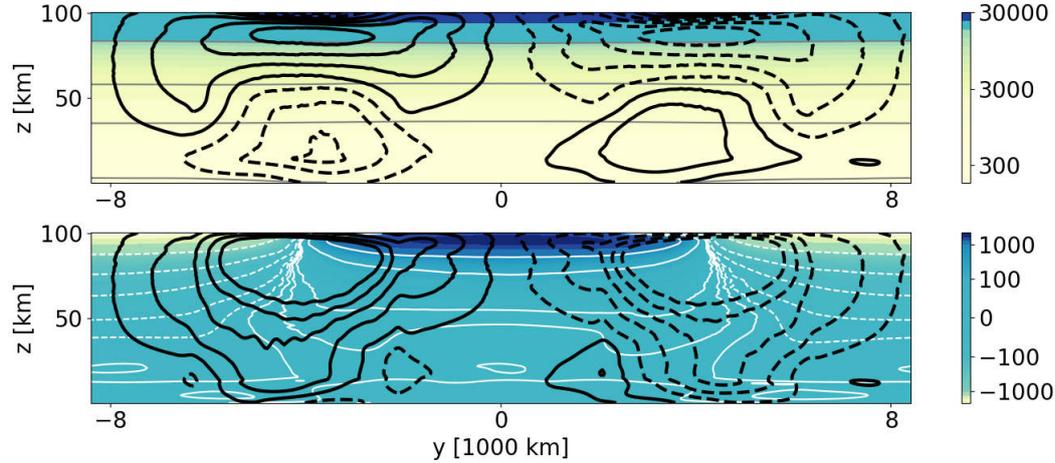


Abbildung 4.9: Die obere Abbildung zeigt jeweils den zonalen und zeitlichen Mittelwert über die Tage 60-120 von u (schwarze Konturen zwischen $[-45, 45]$ m s^{-1} mit einem Konturintervall von 10 m s^{-1}) und θ (farbig und graue Konturen im Bereich zwischen $[3 \times 10^2, 10^5]$ K). In der unteren Abbildung sind deren Abweichungen vom anfänglichen Gleichgewichtszustand, d.h. $[u] - u_{eq}$ (schwarze Konturen wie oben) und $[\theta] - \theta_{eq}$ (farbig und weiße Konturen im Bereich zwischen $[-10^3, 10^3]$ K). Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

$$-\frac{c_p \bar{\theta}}{f} \frac{\partial \pi'}{\partial y} \approx u \quad \text{und} \quad \frac{\partial \pi'}{\partial z} \approx \frac{g}{c_p \bar{\theta}} \theta' \quad (4.7)$$

(siehe auch Abbildung 4.8). Außerdem ist gut erkennbar, dass die beiden zueinander gespiegelten Hemisphären statistisch eine Symmetrie entlang der Achse $y = 0$ km aufweisen. Die marginalen Unterschiede, welche bei genauerer Betrachtung auffallen, sind höchstwahrscheinlich auf numerische Rundungsfehler sowie die begrenzte Anzahl der ausgewerteten Datenpunkte zurückzuführen. Infolgedessen könnte die in y -Richtung gespiegelte Hälfte der Modelldomäne, welche durch die doppelperiodischen Randbedingungen in den beiden horizontalen Raumrichtungen zustande kommt, effizient nutzbar gemacht werden, um beispielsweise mit ausgegebenen Simulationsdaten über 60 Tage die Statistik einer Hemisphäre über den doppelten Zeitraum zu analysieren.

Weiterhin zeigt Abbildung 4.9 den zeitlichen Mittelwert über die letzten 60 Tage (Tag 60-120) der Simulation des zonal gemittelten Zonalwindes und der zonal gemittelten potentiellen Temperatur sowie jeweils deren Abweichung vom anfänglichen Gleichgewichtszustand. Der troposphärische, meridionale Gradient der potentiellen Temperatur ist im Vergleich zum anfänglichen Feld θ_{eq} abgeschwächt und kann mit dem troposphärischen Wärmetransport durch die baroklinen Eddies in Verbindung gebracht werden. Auffällig

ist außerdem ein Anstieg der potentiellen Temperatur direkt unterhalb der Schwamm-
schicht (bei $y = 0$ km und $z > 90$ km) sowie eine Richtungsumkehr des Zonalwindes (bei
 $y \approx \pm 4.2$ km und 50 km $< z < 90$ km).

Von besonderem Interesse ist, ob die beobachteten dynamischen Effekte in Zusammen-
hang mit Schwerewelleneffekten in der realen Atmosphäre gebracht werden können. Auch
wenn eine detaillierte Analyse darüber außerhalb des Rahmens der vorliegenden Arbeit
liegt und künftigen Studien vorbehalten bleibt, wird im Folgenden eine knappe Untersu-
chung der zonal und zeitlich gemittelten zonalen Impulsgleichung (vgl. 4.11) vorgenom-
men. Es wird angenommen, dass $\bar{\rho} \approx \rho$ ist und somit für die zonale Impulsgleichung⁷
(vgl. 2.70)

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \left[\frac{\partial \rho u}{\partial t} \right] \approx f[v] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial y} [\bar{\rho} v u] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} [\bar{\rho} w u] + \frac{1}{\bar{\rho}} [F_x] \quad (4.8)$$

gilt, wobei der letzte Term auf der rechten Seite jeweils die Beiträge des Shapiro-Filters,
der Grenzschicht und der Schwammsschicht zusammenfasst und als Residuum bezeich-
net wird. Im nächsten Schritt werden die Geschwindigkeitsfelder unter Anwendung eines
horizontalen Fourierfilters jeweils in einen großskaligen Anteil und eine kleinskalige Ab-
weichung davon aufgespalten, so dass sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{\bar{\rho}} \left[\frac{\partial \overline{\rho u}^f}{\partial t} \right] &\approx f[\bar{v}^f] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial y} [\bar{\rho} \bar{v}^f \bar{u}^f] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} [\bar{\rho} \bar{w}^f \bar{u}^f] \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho}} [\overline{F_x}^f] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial y} [\bar{\rho} \hat{v} \hat{u}^f] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} [\bar{\rho} \hat{w} \hat{u}^f] \end{aligned} \quad (4.9)$$

ergibt. Hierbei geben die letzten beiden Terme die Flüsse aufgrund von kleinskaligen
(Schwere-)Wellen an, während der zweite und dritte Term auf der rechten Seite der Glei-
chung (4.9) die Flüsse infolge der großskaligen (Rossby-)Wellen kennzeichnen. Schließlich
kann daraus mit dem residuellen Meridionalwind (vgl. z.B. Andrews et al., 1987)

$$[v]^* = [v] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\bar{\rho}}{N^2} \left(\bar{v}^f \bar{b}^f + \hat{v} \hat{b}^f \right) \right] \quad (4.10)$$

die transformierte Darstellung der Gleichung (4.9) hergeleitet werden

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \left[\frac{\partial \overline{\rho u}^f}{\partial t} \right] \approx f[\bar{v}^f]^* + \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \cdot \mathcal{F}_{GS} + \frac{1}{\bar{\rho}} [\overline{F_x}^f] + \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \cdot \mathcal{F}_{KS}, \quad (4.11)$$

⁷Die eckigen Klammern $[\cdot]$ kennzeichnen weiterhin das zeitliche und zonale Mittel der Terme über
die letzten 60 Tage der Simulation.

wobei

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \cdot \mathcal{F}_{GS} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial y} \left[\bar{\rho} \overline{v^f u^f} \right] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \left[\bar{\rho} \overline{w^f u^f} \right] + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{f \bar{\rho}}{N^2} \overline{v^f b^f} \right] \quad (4.12)$$

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \cdot \mathcal{F}_{KS} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial y} \left[\bar{\rho} \overline{\hat{v} \hat{u}^f} \right] - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \left[\bar{\rho} \overline{\hat{w} \hat{u}^f} \right] + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{f \bar{\rho}}{N^2} \overline{\hat{v} \hat{b}^f} \right] \quad (4.13)$$

jeweils die Elissen-Palm-Fluss Divergenz infolge von großskaligen bzw. kleinskaligen Wellen bezeichnen (z.B. Holton, 2004).

In Abbildung 4.10 sind die jeweiligen Terme der Gleichung (4.11, d.h. gemittelt über die letzten 60 Tage) dargestellt. Die Zeitableitung verschwindet dabei in guter Näherung (Abbildung 4.10a). Außerdem zeigt die Auswertung, dass der Effekt der kleinskaligen Wellen (Abbildung 4.10e) in etwa von gleicher Größenordnung ist wie der Beitrag der großskaligen Wellen (Abbildung 4.10c). Darüber hinaus weist der Meridionalwind direkt unterhalb der Schwammschicht relativ starke kleinskalige Strukturen auf (Abbildung 4.10b), welche möglicherweise als stehende Wellen interpretiert werden können. Der entsprechende Beitrag zum Coriolisterm wird größtenteils durch das Residuum ausgeglichen⁸ (Abbildung 4.10d). Weiterhin sind in Abbildung 4.11 die gleichen Terme wie in Abbildung 4.10 gezeigt, jedoch wurde dabei eine leicht abweichende Aufspaltung der Felder vorgenommen: In einen großskaligen Anteil mit horizontalen Wellenlängen, die größer als 3500 km sind (anstelle von 1000 km, analog zu Polichtchouk und Scott, 2020) und eine kleinskalige Abweichung davon. Insbesondere sind direkt unterhalb der Schwammschicht kaum noch kleinskalige Strukturen in $f [\overline{v^f}]^*$ zu erkennen.

Nichtsdestotrotz wird derzeit nach Modellkonfigurationen gesucht, die zu einer Verringerung im residuell gemittelten Meridionalwind beitragen. Allgemein liegt die Vermutung nahe, dass die Dämpfungsstärke der Schwammschicht im vorliegenden Anwendungstestfall noch zu stark gewählt ist und somit keine Absorption (sondern eher eine Reflexion) der Wellen bei $z = 100$ km stattfindet. Einen weiteren Einfluss auf die beobachteten Strukturen könnte außerdem die gewählte Dämpfungszeitskala des Shapiro-Filters haben und es könnte von Vorteil sein den Shapiro-Filter zusätzlich in vertikaler Richtung anzuwenden. Weiterhin könnte eine höhere vertikale Auflösung oder die Verwendung eines physikalischen Turbulenzmodells (anstelle des hier verwendeten Shapiro-Filters) zur Parametrisierung subgitterskaliger Turbulenz notwendig sein, welche dazu beiträgt, dass

⁸Die Ergebnisse des erfolglosen Versuchs, die auftretenden Strukturen durch die Verwendung einer Limiterfunktion innerhalb des Advektionsschemas zu glätten sind in Anhang E zu finden.

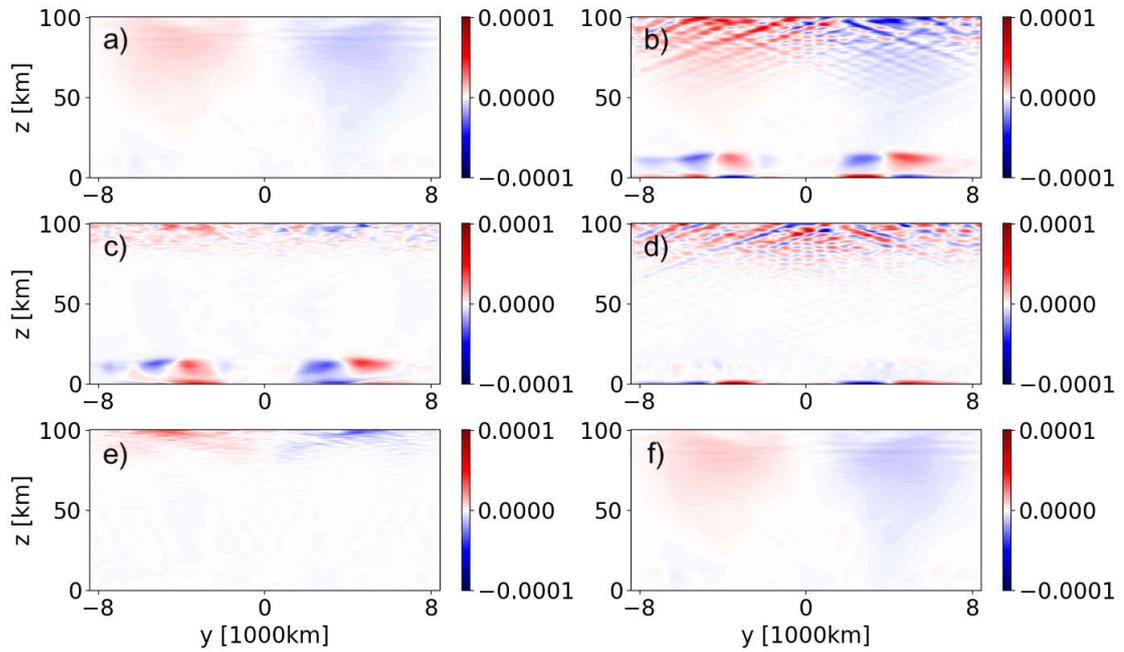


Abbildung 4.10: Gezeigt sind jeweils die Terme der zonal und über die Tage 60-120 zeitlich gemittelten zonalen Impulsgleichung (4.11): a) $\frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \rho u}{\partial t} \right]^f$, b) $f [\bar{v}^f]^*$, c) $\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathcal{F}_{GS}$, d) $\frac{1}{\rho} [\bar{F}_x^f]$, e) $\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathcal{F}_{KS}$, f) die Summe der Terme auf der rechten Seite von (4.11). Die Einheit ist m s^{-2} .

bereits unterhalb der Schwammschicht eine Brechung und Dissipation der kleinskaligen (Schwere-)Wellen stattfindet. Die Wirksamkeit entsprechender Maßnahmen wird aktuell untersucht.

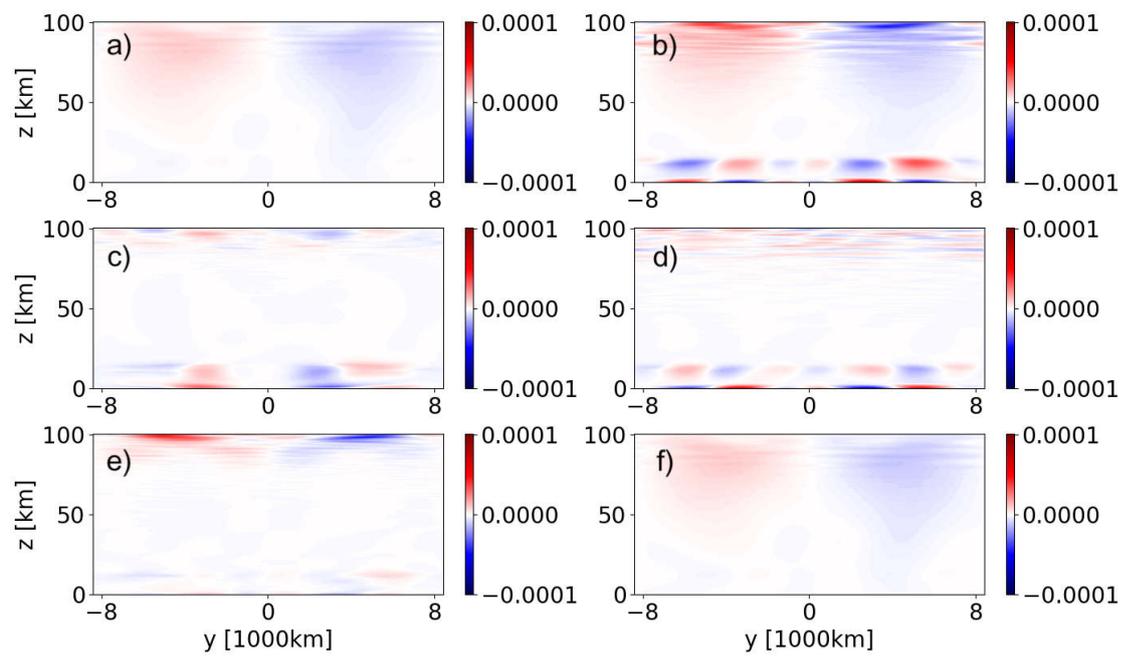


Abbildung 4.11: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung 4.10 gezeigt, jedoch unter Anwendung eines Fourierfilters, welcher Wellenlängen, die länger als 3500 km (anstatt 1000 km) sind, herausfiltert.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Fazit

*Nothing in life is to be feared, it is only to be understood.
Now is the time to understand more, so that we may fear less.*

– Marie Curie

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung, Validierung und Anwendung eines numerischen Verfahrens für die effiziente Modellierung der Dynamik interner Schwerewellen sowie deren Einfluss auf die Zirkulation der mittleren Atmosphäre. Ausgangspunkt zur Implementierung war das pseudo-inkompressible Finite-Volumen-Modell auf einer f -Ebene von Rieper et al. (2013), welches sich bereits zur Entwicklung und Evaluation geeigneter Strategien zur Parametrisierung subgitterskaliger Schwerewellen bewährt hat (Bölöni et al., 2016; Wei et al., 2019). Durch eine Erweiterung des numerischen Verfahrens sollte die präzise und effiziente Simulation diabatischer Atmosphärenprozesse über lange Zeiträume und sehr große Modelldomänen ermöglicht werden.

Dazu wird zunächst der theoretische Hintergrund erläutert, welcher die vollständige Wellenausbreitung in einer Atmosphäre mit variabler Dichte auf der f -Ebene beschreibt. Insbesondere wird die Herleitung einer schallfreien Approximation, die pseudo-inkompressiblen Gleichungen von Durran (1989), dargestellt. Die pseudo-inkompressible Näherung hat den Vorteil, dass diese im Unterschied zu anderen schallfreien Gleichungssystemen (wie beispielsweise die anelastischen Gleichungen) auch in einer Atmosphäre mit stärkerer Schichtung gültig ist (Achatz et al., 2010) und darüber hinaus im Vergleich zu der vollkompressiblen Beschreibung durch die Filterung von Schallwellen eine effizientere, jedoch in führender Ordnung der Mach-Zahl trotzdem konsistente Untersuchung der Dynamik interner Schwerewellen ermöglicht (Klein, 2009). Anschließend wird eine Erweiterung der pseudo-inkompressiblen Gleichungen zur Ergänzung einer Volu-

menheizung basierend auf der Arbeit von O’Neill und Klein (2014) hergeleitet. Durch die Berücksichtigung einer zeitlichen Entwicklung des Hintergrundzustandes, welche zur Kompensation von Heizeffekten (wie beispielsweise thermische Expansion) dient, wird dabei eine physikalisch genauere Beschreibung der diabatischen Dynamik ermöglicht. Die diabatischen pseudo-inkompressiblen Gleichungen werden numerisch durch das Finite-Volumen-Modell *PincFlow* gelöst, welches im Rahmen der vorliegenden Arbeit als direkte Erweiterung der Diskretisierung auf einem versetzten Gitter von Rieper et al. (2013) konzipiert wird. Um diabatische Prozesse in einer trockenen Atmosphäre präzise und effizient simulieren zu können, wird das Modell, welches bisher lediglich die Simulation adiabatischer Atmosphärenprozesse zuließ, durch zwei grundlegende Aspekte erweitert:

1. In Anlehnung an die Studie von O’Neill und Klein (2014) wird es durch eine Wärmequelle inklusive zeitlicher Variation des Hintergrundzustandes ergänzt.
2. Zur Steigerung der Effizienz des Modells wird es durch die Implementierung eines semi-impliziten Zeitschrittverfahrens zweiter Genauigkeitsordnung optimiert, dessen Methodik auf den Studien von Smolarkiewicz und Margolin (1997) und Benacchio und Klein (2019) basiert, jedoch – im Zuge dieser Arbeit nach bestem Wissen und Gewissen – zum ersten Mal auf ein versetztes Gitter adaptiert wird.

Ferner wird die Verwendung des impliziten Turbulenzmodells aus der originalen Implementierung von Rieper et al. (2013) aufgegeben und zur Diskretisierung der advektiven Flüsse ein MUSCL-Schema, wobei $\bar{P}\mathbf{v}$ als Trägerfluss angenommen wird, angewendet (vgl. VanLeer, 2006; Klein, 2009; Benacchio et al., 2014; Benacchio und Klein, 2019).

Zur Überprüfung des numerischen Verfahrens werden eine Reihe zweidimensionaler, atmosphärischer Standardtestfälle durchgeführt. Insbesondere wird dabei die Leistungsfähigkeit von *PincFlow* durch Vergleich der Ergebnisse mit einem expliziten Verfahren bewertet und anhand von Ergebnissen aus der Literatur verifiziert. Die Validierung wird in zwei Abschnitte unterteilt. Der Fokus des ersten Teils der Modellvalidierung liegt zunächst auf der Überprüfung der Genauigkeitsordnung, Stabilität und Effizienz des semi-impliziten Zeitschrittverfahrens, sodass lediglich adiabatische Testfälle betrachtet werden in denen die Hintergrundatmosphäre nicht zeitabhängig ist. Dazu werden die folgenden Prozesse betrachtet:

- Durch die Advektion eines achsensymmetrischen, gegen den Uhrzeigersinn rotierenden glatten Wirbels auf einer stark idealisierten, horizontalen Ebene (ohne Schwerebeschleunigung und Coriolisterm) mit schwacher Strömung (Kadioglu

et al., 2008; Benacchio, 2014) wird gezeigt, dass *PincFlow* (und im Besonderen das Advektionsschema) in der Lage ist, die Strukturen der prognostizierten Felder korrekt zu simulieren. Außerdem wird dessen quadratische Konvergenz bestätigt. Die dabei beobachteten zu geringen Konvergenzraten (< 2) können auf die verwendete Limiterfunktion innerhalb des Advektionsschemas zurückgeführt werden, welche lokal Einfluss auf die Genauigkeitsordnung nehmen (Klein, 2009).

- Die Betrachtung der zeitlichen Entwicklung unterschiedlicher ruhender Atmosphärenzustände (ein neutral geschichteter, ein homogener und ein isothermer Hintergrundzustand) bestätigt, dass *PincFlow* auch in Simulationen über lange Zeiträume, welche eine hohe Anzahl an Zeitschleifeniterationen benötigen, stabil bleibt. Insbesondere entwickeln sich keine bemerkenswerten Geschwindigkeitsfluktuationen (Benacchio, 2014).
- Durch den Testfall, bei welchem jeweils die Ausbreitung nicht-hydrostatischer, hydrostatischer und planetarer Trägheitsschwerewellen in einer Atmosphäre mit konstanter Schichtung (Skamarock und Klemp, 1994; Benacchio und Klein, 2019) simuliert wird, zeigt sich, dass *PincFlow* in der Lage ist, die physikalischen Erhaltungsprinzipien einzuhalten. Außerdem bestätigen die Resultate eine sehr gute Übereinstimmung des Verfahrens mit Ergebnissen aus Simulationen, welche ein explizites Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung verwenden, sowie mit Modellresultaten aus der Literatur. Darüber hinaus wird die hohe Effizienz des semi-impliziten Zeitschrittverfahrens dokumentiert: In Simulationen mit einer groben Auflösung von mehreren Kilometern und über lange Zeiträume verwendet das semi-implizite Schema im Unterschied zu dem Modell mit explizitem Integrationsverfahren eine etwa 70-mal längere durchschnittliche Zeitschrittweite und benötigt eine bis zu 10-mal kürzere Rechenzeit.

Im zweiten Teil der Modellvalidierung werden die Ergebnisse diabatischer Testfälle (d.h. die Implementierung einer Wärmequelle inklusive zeitlich variablem Hintergrundzustand) ausgewertet:

- Die Simulationsergebnisse der zeitlichen Entwicklung einer fallenden kalten Blase innerhalb einer neutral geschichteten Atmosphäre (Straka et al., 1993) validieren die Implementierung einer schwachen Heizung zusammen mit der entsprechenden Dynamik des Hintergrundzustandes und weisen eine hohe Konformität mit Ergebnissen kompressibler Modelle aus der Literatur auf.

- Die Auswertung der Dynamik verschiedener Testfälle anfänglich ruhender Atmosphärenzustände mit unterschiedlichen groß- und kleinskaligen Heizeffekten (basierend auf Almgren et al., 2006; Rieper et al., 2013, d.h. in Anwesenheit einer Heizschicht, einer lokalen Heizblase bzw. einer Heizschicht mit lokaler Heizblase) verifizieren die korrekte Modellierung diabatischer Atmosphärenprozesse durch das semi-implizite Verfahren. Darüber hinaus zeigen diese eine exzellente Übereinstimmung mit Ergebnissen eines explizitem Zeitschemas und dokumentieren ferner, dass die semi-implizite Integration unter Verwendung langer, variabler Zeitschrittweiten keinen signifikanten Einfluss auf die Resultate hat.

Abschließend wird anhand eines drei-dimensionalen Anwendungstestfalls die Leistungsfähigkeit von *PincFlow* zur effizienten Modellierung idealisierter barokliner Wellenaktivität in der Troposphäre sowie der daraus resultierenden kleinskaligen Welleneffekte in der Höhe über lange Zeiträume und auf großen Modelldomänen untersucht. Beispielfähig wird dazu, basierend auf der Konfiguration von Held und Suarez (1994), ein zonal symmetrischer geostrophisch und hydrostatisch balancierter Gleichgewichtszustand initialisiert, welcher in der Troposphäre eine barokline Schichtung aufweist, in der Höhe jedoch barotrop ist. Zur Erzeugung eines baroklin instabilen Strömungsprofils in der Troposphäre wird zu Beginn der Simulation eine schwache Störung auf das Temperaturfeld addiert (Kühnlein et al., 2012; Schemm et al., 2013) und die Modellgleichungen werden durch eine Heizung in Form eines Relaxationsansatzes auf einen vorgegebenen geostrophisch und hydrostatisch balancierten Gleichgewichtszustand (Held und Suarez, 1994; Hien et al., 2018) ergänzt. Die Verwendung von periodischen Randbedingungen in beiden horizontalen Raumrichtungen stellt dabei sicher, dass die beobachteten Effekte der Wellenaktivität einzig durch die interne Dynamik beeinflusst werden (Hien et al., 2018). Die Testsimulationen werden über einen Zeitraum von 120 Tagen durchgeführt und verwenden eine horizontale Auflösung von 50 km. Dabei werden die rechten Seiten der Differentialgleichungen als Abweichung von einem konstanten geostrophisch und hydrostatisch balancierten Gleichgewichtszustand formuliert (Smolarkiewicz et al., 2001; Prusa et al., 2008), um die balancierte Jetströmung durch die räumliche numerische Diskretisierung der Felder auf dem versetzten Modellgitter ausreichend zu repräsentieren. Zur Vermeidung gitterskaliger Oszillationen wird überdies ein Shapiro-Filter achter Ordnung verwendet (Shapiro, 1970). Die gewählte Höhe der Modelldomäne mit einer Schwamm-schicht oberhalb von 100 km Höhe ermöglicht es den kleinskaligen Wellen aufwärts in die anfänglich barotrope mittlere Atmosphäre zu propagieren und somit möglicherweise durch ihre Dissipation Einfluss auf diese zu nehmen.

Ein qualitativer Vergleich der kleinskaligen Wellen, welche anfänglich durch die geostrophische Anpassung an die potentielle Temperaturstörung erzeugt werden mit Simulationsergebnissen einer expliziten Zeitintegration, zeigt eine gute Übereinstimmung, wiewohl auch das semi-implizite Verfahren eine durchschnittlich 11-mal längere Zeitschrittweite verwendet. Allgemein weisen die Ergebnisse barokline Wellenstrukturen in der Troposphäre auf, welche wiederholt Phasen des Wachstums, Umkippens und Zerfalls durchlaufen. Außerdem zeigt das gefilterte horizontale Divergenzsignal kleinskalige Wellenstrukturen, welche höchstwahrscheinlich als spontan emittierte Schwerewellen, die von synoptischen Strömung ausgehen, interpretiert werden können. In der Höhe kann kleinskalige Wellenaktivität beobachtet werden, die teilweise auf die troposphärischen Schwerewellen, welche aufwärts propagieren, zurückgeführt werden kann. Durch die Analyse des zonal und zeitlich gemittelten potentiellen Temperatur- sowie zonalen Geschwindigkeitsfeldes der letzten 60 Tage der Simulation kann ferner ein Effekt auf die Dynamik der mittleren Atmosphäre beobachtet werden, welcher insbesondere durch eine Richtungs-umkehr des Zonalwindes charakterisiert ist und an den Einfluss von Schwerewellen auf die atmosphärische Strömung erinnert.

Nähere Analysen zu den beobachteten Strömungseigenschaften liegen außerhalb des Fokus der vorliegenden Arbeit. Vorläufige Auswertungen der Eliassen-Palm-Fluss Divergenz deuten jedoch darauf hin, dass für den gezeigten Anwendungstestfall der Einfluss infolge der kleinskaligen Wellen in etwa von gleicher Größenordnung ist wie der Beitrag der großskaligen Wellen. Möglicherweise könnte der Effekt der kleinskaligen Strukturen in Simulationen mit höherer Auflösung einen größeren Anteil einnehmen. Darüber hinaus ergeben weitere Analysen, dass am unteren Rand der Schwammschicht Reflexionen stattfinden, die höchstwahrscheinlich durch eine zu stark gewählte Dämpfungsstärke der Schwammschicht in der aktuellen Modellkonfiguration verursacht sind. Weiterhin könnte es künftig von Vorteil sein, das Shapiro-Verfahren zur Filterung der gitterskaligen Wellenaktivität durch eine physikalische Turbulenzparametrisierung (beispielsweise ein dynamisches Smagorinsky-Modell, siehe Germano et al., 1991; Lilly, 1992) zu ersetzen. Weitere Untersuchungen und Maßnahmen zu einer möglichen Verbesserung der Modellkonfiguration werden aktuell diskutiert und erste Testläufe dazu durchgeführt, bleiben jedoch im Rahmen dieser Arbeit ungeklärt.

Nichtsdestotrotz stimmen die in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse inklusive der enormen Effizienzsteigerung durch das semi-implizite Zeitschrittverfahren zuversichtlich, dass eine weitere Entwicklung und Anwendung des Modells einen wissenschaftlichen Fortschritt zur Erforschung des Lebenszyklus von Schwerewellen bringt. Insbesondere die sponante Schwerewellenabstrahlung im Bereich atmosphärischer Strahlströme

und Temperaturfronten sowie der Einfluss der emittierten Wellen auf die mittlere Atmosphäre könnte künftig mit Hilfe einer geeigneten Modellkonfiguration effizient modelliert und analysiert werden. So könnte beispielsweise die statistische Symmetrie, welche die gezeigte Modelldomäne in Bezug auf die Achse um $y = 0$ km aufweist, unter speziellen Konfigurationen effizient dazu genutzt werden, um mit ausgegebenen Simulationsdaten über 60 Tage die Statistik einer Hemisphäre über den doppelten Zeitraum zu analysieren. Darüber hinaus wäre es im nächsten Schritt sinnvoll, zusätzlich eine Topographie in das semi-implizite Modell zu implementieren, beispielsweise durch eine sogenannte *Immersed Boundary Methode*, sodass *PincFlow* in Zukunft auch zur Modellierung orographischer Schwerewellen verwendet werden kann.

Anhang A

Strategie zur Gewährleistung grundlegender Gleichgewichte

Ein wesentlicher Nachteil der in Kapitel 2.4.6 beschriebenen räumlichen Diskretisierung der Gleichungen durch die Verwendung zentraler Differenzen zweiter Ordnung auf dem versetzten Gitter ist, dass in Abwesenheit einer Heizung ($S = \langle S \rangle = 0$ und $\langle w \rangle = 0$) das geostrophische und hydrostatische Gleichgewichts nicht ausreichend repräsentiert werden kann. Beispielsweise lautet der Prädiktorschritt des vertikalen Geschwindigkeitsfeldes und der Auftriebsfluktuation (2.104) und (2.105) ohne Subtraktion eines vordefinierten Gleichgewichtszustandes (und ohne Rayleigh-Dämpfung)

$$w_{k+1/2}^{*,n+1} = \frac{\left[w^n - \Delta t c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \pi'^{*,n}}{\partial z} \right]_{k+1/2} + \Delta t \left[b'^{*,n} + \Delta t \frac{\chi_{r,g}}{\rho^\circ} S^\circ \right]_{k+1/2}}{1 + \frac{\chi_{r,k+1/2}}{\chi_{k+1/2}^\circ} (N_{k+1/2} \Delta t)^2}, \quad (\text{A.1})$$

$$b_k'^{*,n+1} = \frac{-\frac{\chi_{r,k}}{\chi_k^\circ} N_k^2 \Delta t \left[w^n - \Delta t c_p \frac{1}{\chi^\circ} \frac{\partial \pi'^{*,n}}{\partial z} \right]_k + \left[b'^{*,n} + \Delta t \frac{\chi_{r,g}}{\rho^\circ} S^\circ \right]_k}{1 + \frac{\chi_{r,k}}{\chi_k^\circ} (N_k \Delta t)^2}. \quad (\text{A.2})$$

Für den Fall eines hydrostatischen Gleichgewichts, wobei $w = 0$ gilt, und unter Vernachlässigung der Heizung ergibt sich daraus jeweils

$$\frac{1}{2}(b_k'^{*,n+1} + b_{k+1}'^{*,n+1}) = \frac{c_p}{\chi_{k+1/2}^\circ} \frac{\pi_{k+1}'^{*,n+1} - \pi_k'^{*,n+1}}{\Delta z} \quad \text{und} \quad (\text{A.3})$$

$$b_k'^{*,n+1} = \frac{1}{2} \left(\frac{c_p}{\chi_{k+1/2}^\circ} \frac{\pi_{k+1}'^{*,n+1} - \pi_k'^{*,n+1}}{\Delta z} + \frac{c_p}{\chi_{k-1/2}^\circ} \frac{\pi_k'^{*,n+1} - \pi_{k-1}'^{*,n+1}}{\Delta z} \right), \quad (\text{A.4})$$

woraus

$$b'_k{}^{n+1} = \frac{1}{2}(b'_{k+1}{}^{n+1} + b'_{k-1}{}^{n+1}) \quad (\text{A.5})$$

folgt. Dementsprechend wäre nur die Verwendung von linearen Auftriebsprofilen, wie beispielsweise $b'_k = B_0 + B_1 z_k$ ($B_0, B_1 = \text{konstant}$), möglich, was auf die linearen Interpolationen in (A.3) und (A.4) zurückzuführen ist, welche ein exaktes hydrostatisches Gleichgewicht verhindern. Dies ist jedoch im Rahmen der meisten atmosphärischen Anwendungsfälle nicht praktikabel. Zu ähnlichen Erkenntnissen kann man gelangen, wenn die Analyse für den Fall eines geostrophischen Gleichgewichts durchgeführt wird (nicht gezeigt). Die lineare Interpolation der Geschwindigkeiten innerhalb des Coriolisterms sowie der horizontalen Ableitung der Exnerdruckfluktuationen in (2.102) und (2.103) verhindern dabei die Einhaltung des geostrophischen Gleichgewichts. Indem ein vordefinierter Gleichgewichtszustand von den Gleichungen subtrahiert wird (vgl. 2.90), kann zumindest sichergestellt werden, dass diese vorgegebene Gleichgewichtsbeziehung in Abwesenheit einer Heizung erfüllt bleibt. Eine genaue Beschreibung des in der vorliegenden Arbeit verwendeten analytischen Gleichgewichtszustandes zur Anwendung dieser Strategie wurde bereits in Abschnitt 2.4.3 gegeben. Darüber hinaus findet sich eine Analyse der Stationarität des Modells bzgl. des vordefinierten Gleichgewichtszustandes in Kapitel 4.

Anhang B

Drucklöser

In diesem Abschnitt werden einige technische Details zur Umsetzung des iterativen BiCGSTAB-Verfahrens, welches zum Lösen der elliptischen Gleichung (2.107) in *Pinc-Flow* verwendet wird, skizziert. Die Beschreibung basiert auf Anhang A in Schmid et al. (2021).

Die nahezu exponentielle Höhenabhängigkeit von \bar{P} und ρ wie auch die Proportionalität der fluktuierenden Geschwindigkeitsamplituden zur inversen Wurzel der Dichte der Referenzatmosphäre in der unteren Atmosphäre führt zu einer vertikalen Abhängigkeit der rechten Seiten in (2.107) sowie der Koeffizienten auf deren linken Seite. Infolgedessen wichtet das BiCGSTAB-Verfahrens die unteren Schichten der Modelldomäne zu stark, sodass in einigen Modellläufen beobachtet werden konnte, dass das iterative Verfahren nicht mehr konvergiert und letztendlich zu einem Abbruch des Modells führt. Zur Vermeidung dieses Sachverhaltes (wobei jedoch weiterhin die Höhenabhängigkeit der Exnerdruckfluktuationen berücksichtigt werden sollen), wird Gleichung (2.107) mit $\sqrt{\rho^\circ}/\bar{P}$ gewichtet, sodass gilt

$$\begin{aligned}
& \frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\bar{P}^{\circ 2} (1 + \alpha_v \Delta t) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \tilde{\pi}^{n+1} \right) + f \Delta t \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \tilde{\pi}^{n+1} \right)}{\rho^\circ (1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2} \right\} \\
& + \frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{\bar{P}^{\circ 2} (1 + \alpha_u \Delta t) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \tilde{\pi}^{n+1} \right) - f \Delta t \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \tilde{\pi}^{n+1} \right)}{\rho^\circ (1 + \alpha_u \Delta t)(1 + \alpha_v \Delta t) + (f \Delta t)^2} \right\} \\
& + \frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\bar{P}^{\circ 2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \tilde{\pi}^{n+1} \right)}{\rho^\circ (1 + \alpha_w \Delta t) + \frac{\chi_r^\circ}{\chi^\circ} (N \Delta t^\circ)^2} \right] \\
& = \frac{\sqrt{\rho^\circ}}{\bar{P}^\circ} \left\{ \nabla \cdot \left[\bar{P}^\circ (\mathbf{v}^{*,n+1} - \langle w \rangle^\circ \mathbf{e}_z) \right] - (S^\circ - \langle S \rangle^\circ) \right\}, \tag{B.1}
\end{aligned}$$

wobei $\tilde{\pi} = \delta\phi'c_p\sqrt{\rho^\circ}/\bar{P}^\circ$ die reskalierten Exnerdruckinkremente kennzeichnen. Darüber hinaus kann die Gleichung (B.1) zusammengefasst werden als

$$\mathcal{L}_h(\tilde{\pi}) + \mathcal{L}_v(\tilde{\pi}) = b, \quad (\text{B.2})$$

sodass der Operator auf der linken Seite jeweils in einen horizontalen und vertikalen Anteil aufgeteilt werden kann. Ersterer weist dabei eine ähnliche Struktur wie der horizontale Laplace-Operator auf. Um eine (schnellere) Konvergenz des verwendeten, iterativen Algorithmus zu gewährleisten, wird ein Vorkonditionierer verwendet. Dieser löst das Hilfsgleichungssystem

$$\frac{d\tilde{\pi}}{d\eta} = \mathcal{L}_h(\tilde{\pi}) + \mathcal{L}_v(\tilde{\pi}) - b, \quad (\text{B.3})$$

welches für $\eta \rightarrow \infty$ gegen die gesuchte Lösung konvergiert. Ferner skalieren die Eigenwerte der diskretisierten, horizontalen und vertikalen Anteile des Operators mit $1/(\Delta x)^2 + 1/(\Delta y)^2$ bzw. $1/(\Delta z)^2$. Infolgedessen besitzt der vertikale Anteil im Fall, dass $(\Delta z)^2 \ll (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2$ gilt weitaus größere Eigenwerte (im Vergleich zum horizontalen Anteil des Operators), weshalb die Gleichung (B.3) am effizientesten semi-implizit über

$$(1 - \Delta\eta\mathcal{L}_v)(\tilde{\pi}^{m+1}) = (1 + \Delta\eta\mathcal{L}_h)(\tilde{\pi}^m) + \Delta\eta b \quad (\text{B.4})$$

gelöst wird. In der vorliegenden Arbeit wird zur Lösung des semi-impliziten Problems (B.4) der Thomas-Algorithmus für tridiagonale Matrizen verwendet (Isaacson und Keller, 1966), wobei der Pseudo-Zeitschritt $\Delta\eta$ so gewählt wird, dass sein Produkt mit dem größten Eigenwert des horizontalen Operatoranteils kleiner als 1 ist. Genauer gesagt gilt

$$\Delta\eta = \frac{\gamma}{2/(\Delta x)^2 + 2/(\Delta y)^2}, \quad (\text{B.5})$$

wobei γ einen anpassbaren Parameter darstellt. Darüber hinaus wird eine maximale Anzahl an Pseudo-Zeitschritten M , d.h. die Anzahl der Iterationen des Vorkonditionierers, festgelegt. Empirisch durchgeführte Testsimulationen zeigten, dass Werte im Bereich von $0.5 \leq \gamma \leq 0.8$ und $2 \leq M \leq 10$ geeignet sind. Zeigt das vorkonditionierte BiCGStab-Verfahren ein langsames Konvergenzverhalten, kann eine höhere Effizienz (d.h. eine raschere Konvergenz) durch einen größer gewählten Wert von M (d.h. $M \gg 10$) erreicht werden.

Weiterführende Erläuterungen zu iterativen Methoden und deren Konvergenzverhalten zum Lösen linearer Gleichungssysteme sowie Vorkonditionierung findet sich beispielsweise in Van der Vorst (2003).

Anhang C

Shapiro Filter

Das Shapiro-Verfahren zur Filterung gitterskaliger Oszillationen wird innerhalb der semi-impliziten Zeitschrittmethode in zonaler und meridionaler Richtung auf die prognostizierten Dichte- und Geschwindigkeitsfelder angewendet und jeweils nach jedem der drei Prädiktorschritte (vgl. den expliziten Schritt (2.83) und die beiden impliziten Schritte (2.82) und (2.86) mit (2.102) - (2.105) in Abschnitt 2.4.5 und 2.4.5) eingebunden. Es lautet

$$\widehat{\phi}_{i,j,k}^n = \phi_{i,j,k}^n + (-1)^{n_{shapiro}-1} \alpha_{shapiro} (S_x + S_y)^{n_{shapiro}} \phi_{i,j,k}^n \quad (\text{C.1})$$

mit den dimensionslosen Operatoren angewendet auf $\phi_{i,j,k}$:

$$S_x \phi_{i,j,k} = \frac{1}{4} (\phi_{i-1,j,k} + \phi_{i+1,j,k} - 2\phi_{i,j,k}), \quad (\text{C.2})$$

$$S_y \phi_{i,j,k} = \frac{1}{4} (\phi_{i,j-1,k} + \phi_{i,j+1,k} - 2\phi_{i,j,k}). \quad (\text{C.3})$$

Dabei kennzeichnet $\widehat{\phi}$ die gefilterte Variable und $n_{shapiro} = 8$ gibt die Ordnung des Filters an. Ein Shapiro-Filter achter Ordnung dämpft alle Komponenten mit Wellenlängen kleiner als vier Gitterzellen, filtert jedoch nicht die Wellen mit Wellenlängen größer als sechs Gitterzellen (Shapiro, 1975; Lauritzen et al., 2011). Eine Übersicht und Diskussion über die verschiedenen Ordnungen des Verfahrens findet sich außerdem in Lauritzen et al. (2011). Ferner gibt der Faktor $\alpha_{shapiro}$ die Stärke des Filters an und errechnet sich über $\alpha_{shapiro} = \min(1, \Delta t / \tau_{shapiro})$. Durch empirisch durchgeführte Testläufe erwies sich eine variierende Dämpfungszeitskala von $\tau_{shapiro} = 10\Delta t$ als sinnvoll.

Anhang D

Brechendes Schwerewellenpaket

Es wird die Ausbreitung eines vorgeschriebenen Schwerewellenpakets durch eine ruhende, isotherme Atmosphäre (vgl. Referenzzustand Nr. 3 in Abschnitt 3.1.2) mit $f = 0$ betrachtet, welches ausgehend von einer bestimmten Höhe aufwärts propagiert und schließlich bricht. Anhand des Testfalls soll einerseits die Funktionsweise des in dieser Arbeit verwendeten Shapiro-Filters (Shapiro, 1970) achter Ordnung (vgl. Anhang C) demonstriert werden, welcher hierbei in zonaler und meridionaler Richtung auf die prognostizierten Felder $(\rho, \rho', \mathbf{v})$ angewendet wird. Andererseits soll verifiziert werden, dass *PincFlow mit SI* in der Lage ist, brechende Schwerewellenpakete zu simulieren¹.

Basierend auf Rieper et al. (2013) wird innerhalb eines zweidimensionalen Modellgebiets der Größe $(x, z) \in [0, 80]^2 \text{ km}^2$ ein Gauß'sches Schwerewellenpaket mit einer anfänglichen höhenabhängigen Wellenamplitude der Form

$$\hat{b}(x, z) = a \frac{N^2}{m_0} \exp\left(\frac{(z - z_c)^2 + (x - x_c)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (\text{D.1})$$

gewählt. Dabei beschreiben $a = 0.9$ die entdimensionalisierte Wellenamplitude (die Amplitude relativ zur Grenze der statischen Instabilität) und $\sigma = 5 \text{ km}$ die Breite des Wellenpakets, welches zu Beginn um $x_c = z_c = 20 \text{ km}$ zentriert ist. Die Wellen besitzen eine anfängliche horizontale und vertikale Wellenlänge von $\lambda_{x_0} = \lambda_{z_0} = 4 \text{ km}$, Wellenzahlen der Größe $\mathbf{k}_0 = (k_0, m_0) = (2\pi/\lambda_{x_0}, 2\pi/\lambda_{z_0})$ sowie die intrinsische Frequenz $\hat{\omega} = -Nk_0 / \|\mathbf{k}_0\|$.

Die anfänglichen Auftriebs-, Exnerdruck- sowie Geschwindigkeitsfelder werden aus den Polarisationsbeziehungen linearer Schwerewellen berechnet² (vgl. D.51 – D.54), sodass

¹Die Beschreibung und Analyse des Testfalls basiert auf Rieper et al. (2013).

²Eine Herleitung der Dispersions- und Polarisationsrelationen der grundlegenden Wellenmoden in einer Atmosphäre in Ruhe ist in Abschnitt D.1 dargestellt.

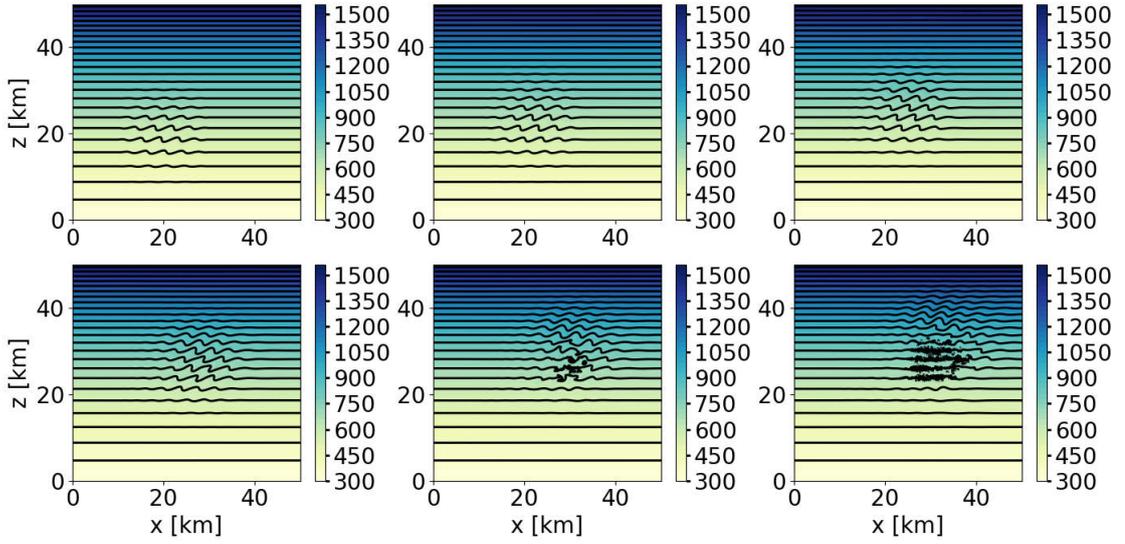


Abbildung D.1: Potentielle Temperatur [K] zu den Zeitpunkten $t = 0, 10, 20, 30, 40$ und 50 min (von links oben nach rechts unten) für *PincFlow mit SI* (ohne Shapiro-Filter). Das Konturintervall der Isentropen beträgt jeweils 50 K.

$$u(x, z, t_0) = \frac{m_0}{k_0} \frac{\hat{\omega}}{N^2} \hat{b} \sin(k_0 x + m_0 z), \quad (\text{D.2})$$

$$w(x, z, t_0) = -\frac{\hat{\omega}}{N^2} \hat{b} \sin(k_0 x + m_0 z), \quad (\text{D.3})$$

$$b(x, z, t_0) = \hat{b} \cos(k_0 x + m_0 z), \quad (\text{D.4})$$

$$\pi(x, z, t_0) = \frac{m_0}{k_0^2} \frac{\hat{\omega}^2}{N^2} \frac{1}{c_p \theta_r(z)} \hat{b} \sin(k_0 x + m_0 z) \quad (\text{D.5})$$

gilt (vgl. Rieper et al., 2013). Zur Simulation dieses Testfalls wird die Domäne mit 640×640 Gitterpunkten diskretisiert und die zeitliche Auflösung errechnet sich über (2.54) mit $\nu = 1/6$. Abbildung D.1 zeigt die zeitliche Entwicklung des potentiellen Temperaturfeldes simuliert mit *PincFlow mit SI*, jedoch ohne Anwendung des Shapiro-Filters. Es ist deutlich zu erkennen wie das anfänglich vorgeschriebene Wellenpaket aufwärts propagiert und dabei steilere Amplituden entwickelt (Rieper et al., 2013). Nach 40 min kann beobachtet werden, wie nicht-lineare Effekte auftreten und das Wellenpaket schließlich bricht³. Durch die Brechung der Wellen werden anschließend immer kleine-

³Da der Fokus der Untersuchungen auf numerischen Aspekten des Modells liegt, wird hierbei, ähnlich wie in Rieper et al. (2013), im Folgenden nicht näher auf die Charakteristiken der Turbulenz eingegangen.

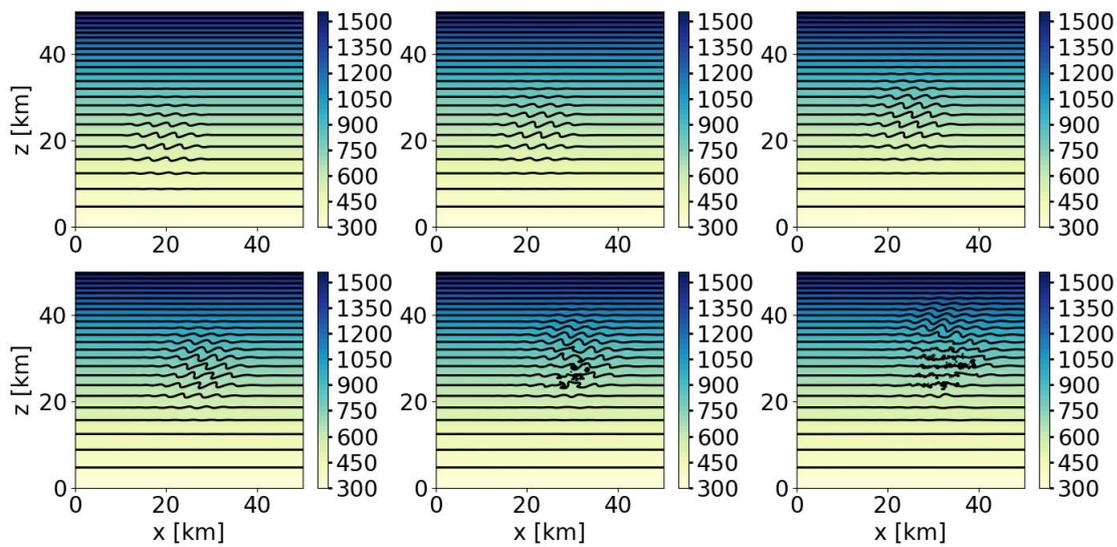


Abbildung D.2: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung D.1 für *PincFlow mit SI* gezeigt, jedoch unter Anwendung des Shapiro-Filters.

re räumliche Skalen erzeugt, bis diese vergleichbar mit der Größe der Gitterauflösung sind (vgl. θ nach 50 min bzw. 60 min). Weiterhin sind in Abbildung D.2 Ergebnisse von *PincFlow mit SI* unter Anwendung des implementierten Shapiro-Filters dargestellt. Insbesondere ist zu beobachten, dass der Zeitpunkt des Wellenbrechens nicht durch den Shapiro-Filter beeinflusst wird. Ferner lassen die Felder nach 40 min erkennen, wie durch das implementierte Shapiro-Verfahren die gitterskaligen Oszillationen effektiv gedämpft werden und bestätigen somit dessen Funktionsweise.

D.1 Wellenmoden in einer Atmosphäre mit variabler Dichte

Ausgangspunkt zur Herleitung der Dispersions- und Polarisationsrelationen der grundlegenden Wellenmoden in einer ruhenden Atmosphäre mit höhenabhängiger Dichte⁴ bilden die pseudo-inkompressiblen Gleichungen (vgl. 2.13 – 2.16) ohne Heizung und somit konstantem Hintergrundzustand $\bar{P} \rightarrow \bar{P}(z)$, welche auch geschrieben werden können als

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (\text{D.6})$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} + f \mathbf{e}_z \times \mathbf{u} = -c_p \theta \nabla \pi - g \mathbf{e}_z, \quad (\text{D.7})$$

$$\frac{D\theta}{Dt} = 0, \quad (\text{D.8})$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\theta} \mathbf{v}) = 0, \quad (\text{D.9})$$

$$\bar{P} = \rho \theta = \bar{\rho} \bar{\theta}. \quad (\text{D.10})$$

Weiterhin wird die Dynamik einer infinitesimal kleinen Abweichung von der zeitunabhängigen, hydrostatischen Referenzatmosphäre in Ruhe betrachtet, d.h. die Zustandsvariablen werden in einen höhenabhängigen, großskaligen Anteil und eine kleinskalige Abweichung davon zerlegt, sodass

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}', \quad (\text{D.11})$$

$$\rho = \bar{\rho}(z) + \rho', \quad (\text{D.12})$$

$$\pi = \bar{\pi}(z) + \pi', \quad (\text{D.13})$$

$$\theta = \bar{\theta}(z) + \theta', \quad (\text{D.14})$$

wobei

$$c_p \bar{\theta} \frac{\partial \bar{\pi}}{\partial z} = -g \quad (\text{D.15})$$

(vgl. Achatz et al., 2010). Es wird angenommen, dass die Störterme wesentlich kleiner sind als die Referenzgrößen, welche in einer isothermen Atmosphäre ($\bar{T} = \text{konst.}$, $N^2 = \text{konst.}$) durch die exponentiellen Profile

⁴Die Ausarbeitung orientiert sich an der theoretischen Beschreibung in Achatz et al. (2010).

$$\bar{\rho} = \rho_{ref} \exp\left(\frac{-z}{H}\right), \quad (\text{D.16})$$

$$\bar{\theta} = \bar{T} \exp\left(\frac{-z}{H_\theta}\right) \quad (\text{D.17})$$

definiert sind, wobei $H = R\bar{T}/g$ und $H_\theta = Hc_p/R$ jeweils die konstante Skalenhöhe der Dichte und die Skalenhöhe der potentiellen Temperatur der Referenzatmosphäre bezeichnet. Im nächsten Schritt wird die Zerlegung in das Gleichungssystem (D.6) - (D.10) eingesetzt und es werden alle nicht-linearen Terme der kleinskaligen Störgrößen vernachlässigt, woraus sich mit $b = b' = g\theta'/\bar{\theta}$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}') = 0, \quad (\text{D.18})$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial t} + f \mathbf{e}_z \times \mathbf{u}' = -c_p \bar{\theta} \nabla \pi' + b' \mathbf{e}_z, \quad (\text{D.19})$$

$$\frac{\partial \theta'}{\partial t} + w' \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} = 0 \rightarrow \frac{\partial b'}{\partial t} + N^2 w' = 0, \quad (\text{D.20})$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}') = 0, \quad (\text{D.21})$$

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} = -\frac{\theta'}{\bar{\theta}} \quad (\text{D.22})$$

ergibt. Im Anschluss daran wird eine Fourierentwicklung der kleinskaligen Felder durchgeführt

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}' \\ b' \\ \pi' \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dl \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i(kx+ly-\omega t)} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{v}} e^{\frac{z}{2H}} \\ \tilde{b} e^{\frac{z}{2H}} \\ \tilde{\pi} e^{-\frac{z}{H_\theta} + \frac{z}{2H}} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.23})$$

wobei die Größen $\tilde{\mathbf{z}}$ die Fouriertransformierten bezeichnen und $\mathbf{k} = (k, l, m)$ sowie ω jeweils die Wellenzahlen und die Wellenfrequenz sind. Einsetzen der Entwicklung in das Gleichungssystem (D.19) - (D.21) ergibt

$$-i\omega\tilde{u} - f\tilde{v} = -ikc_p\bar{T}\tilde{\pi}, \quad (\text{D.24})$$

$$-i\omega\tilde{v} + f\tilde{u} = -ilc_p\bar{T}\tilde{\pi}, \quad (\text{D.25})$$

$$-i\omega\tilde{w} - \tilde{b} = c_p\bar{T} \left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - \frac{d}{dz} \right) \tilde{\pi}, \quad (\text{D.26})$$

$$-i\omega\tilde{b} + N^2\tilde{w} = 0, \quad (\text{D.27})$$

$$0 = ik\tilde{u} + il\tilde{v} + \left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - \frac{d}{dz} \right) \tilde{w}. \quad (\text{D.28})$$

Da hierbei die Koeffizienten nicht mehr von z abhängen, können die Gleichungen zusätzlich einer vertikalen Fouriertransformation unterzogen werden

$$\begin{pmatrix} \hat{\tilde{v}} \\ \hat{\tilde{b}} \\ \hat{\tilde{\pi}} \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dm e^{imz} \begin{pmatrix} \hat{\tilde{v}} \\ \hat{\tilde{b}} \\ \hat{\tilde{\pi}} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.29})$$

wobei $\hat{\tilde{z}}$ die Fourieramplituden bezeichnen, sodass sich die linearisierten pseudo-inkompressiblen Gleichungen (ohne Heizung) im Fourierraum ergeben

$$-i\omega\hat{u} - f\hat{v} = -ikc_p\bar{T}\hat{\pi}, \quad (\text{D.30})$$

$$-i\omega\hat{v} + f\hat{u} = -ilc_p\bar{T}\hat{\pi}, \quad (\text{D.31})$$

$$-i\omega\hat{w} - \hat{b} = \left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - im \right) c_p\bar{T}\hat{\pi}, \quad (\text{D.32})$$

$$-i\omega\hat{b} + N^2\hat{w} = 0, \quad (\text{D.33})$$

$$0 = -ik\hat{u} - il\hat{v} - \left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - im \right) \hat{w}. \quad (\text{D.34})$$

Weiterhin lautet das obige lineare Gleichungssystem in Matrix-Vektor Schreibweise

$$\begin{pmatrix} -i\omega & -f & 0 & 0 & ikc_p\bar{T} \\ f & -i\omega & 0 & 0 & ilc_p\bar{T} \\ 0 & 0 & -i\omega & -1 & \left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - im \right) c_p\bar{T} \\ 0 & 0 & N^2 & -i\omega & 0 \\ ik & il & \left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - im \right) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \hat{b} \\ \hat{\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.35})$$

dessen Determinante verschwinden muss, um nicht-triviale Lösungen zu erhalten. Dies liefert die balancierte, geostrophische Mode mit der Eigenfrequenz

$$\omega_g = 0 \quad (\text{D.36})$$

sowie die beiden Schwerewellenmoden

$$\omega_{SW}^2 = \frac{N^2(k^2 + l^2) + f^2(m^2 + \left(\frac{1}{2H} - \frac{1}{H_\theta}\right)^2)}{k^2 + l^2 + m^2 + \left(\frac{1}{2H} - \frac{1}{H_\theta}\right)^2}, \quad (\text{D.37})$$

welche die Frequenz der Schwerewelle mit ihren Wellenzahlen verknüpft und als Dispersionsrelation bezeichnet wird. Die Eigenvektoren der geostrophischen Mode erhält man nun durch einsetzen von (D.36) in (D.30) - (D.33), woraus sich die Beziehungen

$$\hat{u} = \frac{-il}{f} c_p \bar{T} \hat{\pi}, \quad (\text{D.38})$$

$$\hat{v} = \frac{ik}{f} c_p \bar{T} \hat{\pi}, \quad (\text{D.39})$$

$$\hat{w} = 0, \quad (\text{D.40})$$

$$\hat{b} = -\left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} - im\right) c_p \bar{T} \hat{\pi} \quad (\text{D.41})$$

ergeben. Analog können die Schwerewellenmoden berechnet werden. Dazu werden zunächst die Gleichungen (D.30) und (D.31) mit $\mp i \sqrt{\omega_{SW}^2}$ multipliziert, sodass sich durch Umformung die Beziehungen

$$\hat{u} = \frac{k\omega_{SW} + if}{\omega_{SW}^2 - f^2} c_p \bar{T} \hat{\pi}, \quad (\text{D.42})$$

$$\hat{v} = \frac{l\omega_{SW} - ikf}{\omega_{SW}^2 - f^2} c_p \bar{T} \hat{\pi}, \quad (\text{D.43})$$

sowie aus (D.33) die Beziehung

$$\hat{w} = i \frac{\omega_{SW}}{N^2} \hat{b} \quad (\text{D.44})$$

herleiten lassen und folglich aus der Divergenzbeziehung (D.34) mit (D.44) die Beziehung

$$c_p \bar{T} \hat{\pi} = i \frac{\left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} + im\right) (\omega_{SW}^2 - f^2)}{\omega_{SW}(k^2 + l^2)} \hat{w} \quad (\text{D.45})$$

$$= - \frac{\left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} + im\right) (\omega_{SW}^2 - f^2)}{N^2(k^2 + l^2)} \hat{b} \quad (\text{D.46})$$

ergibt. Des Weiteren führt das Einsetzen von (D.45) in (D.42) und (D.43) auf

$$\hat{u} = - \frac{\left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} + im\right) (k\omega_{SW} + ilf)}{N^2(k^2 + l^2)} \hat{b}, \quad (\text{D.47})$$

$$\hat{v} = - \frac{\left(\frac{1}{H_\theta} - \frac{1}{2H} + im\right) (l\omega_{SW} - ikf)}{N^2(k^2 + l^2)} \hat{b}. \quad (\text{D.48})$$

Die Gleichungen (D.47), (D.48), (D.44) und (D.45) werden auch als Polarisationsbeziehungen bezeichnet und beschreiben die Amplitudenbeziehungen zwischen den verschiedenen dynamischen Wellenfeldern. Zuletzt wird noch der häufig auftretende Spezialfall von Schwerewellen mit ausreichend großen vertikalen Wellenzahlen betrachtet, so dass

$$|m| \gg \frac{1}{2H} \quad \text{und} \quad |m| \gg \frac{1}{H_\theta} \quad (\text{D.49})$$

gilt, und folglich die Dispersionsrelation sowie die Polarisationsbeziehungen für Schwerewellen durch

$$\omega_{SW}^2 = \frac{N^2(k^2 + l^2) + f^2 m^2}{k^2 + l^2 + m^2}, \quad (\text{D.50})$$

und

$$\hat{u} = - \frac{im(k\omega_{SW} + ilf)}{N^2(k^2 + l^2)} \hat{b}, \quad (\text{D.51})$$

$$\hat{v} = - \frac{im(l\omega_{SW} - ikf)}{N^2(k^2 + l^2)} \hat{b}, \quad (\text{D.52})$$

$$\hat{w} = i \frac{\omega_{SW}}{N^2} \hat{b}, \quad (\text{D.53})$$

$$c_p \bar{T} \hat{\pi} = - \frac{im(\omega_{SW}^2 - f^2)}{N^2(k^2 + l^2)} \hat{b} \quad (\text{D.54})$$

approximiert werden können.

Anhang E

Idealisierte barokline Lebenszyklen mit Limiterfunktion

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse des Modelllaufs zum Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen unter Anwendung einer Limiterfunktion innerhalb des Advektionsschemas skizziert. Es wird die gleiche Modellkonfiguration wie in Abschnitt 4.2 gewählt, jedoch inkl. der Limiterfunktion (2.118), halber Spongstärke $\alpha_{max} = 0.5$ und $\tau_{shapiro} = \text{const.} = 1.5 \text{ h}$ (vgl. Held und Suarez, 1994). Auch wenn die zeitliche Entwicklung der großskaligen, baroklinen Wellen in der Troposphäre sehr ähnliche Strukturen aufweisen (nicht gezeigt) und allgemein in der Höhe glattere Strukturen als in einer entsprechenden Rechnung ohne Limiterfunktion zu erkennen sind, entwickeln sich (vorallem auf der südlichen Hemisphäre) unterhalb der Schwammschicht sehr hohe Windgeschwindigkeiten¹ (vgl. Abbildung E.1). Über den Auslöser dieser (wahrscheinlich unphysikalischen Störung) kann derzeit lediglich spekuliert werden. Eine mögliche Ursache könnte eine Symmetriebrechung, möglicherweise durch eine Ungenauigkeit bei der Implementierung des Limiters im Modell, sein.

¹Die Anwendung unterschiedlicher Limiterfunktionen ergab ähnliche Ergebnisse (nicht gezeigt).

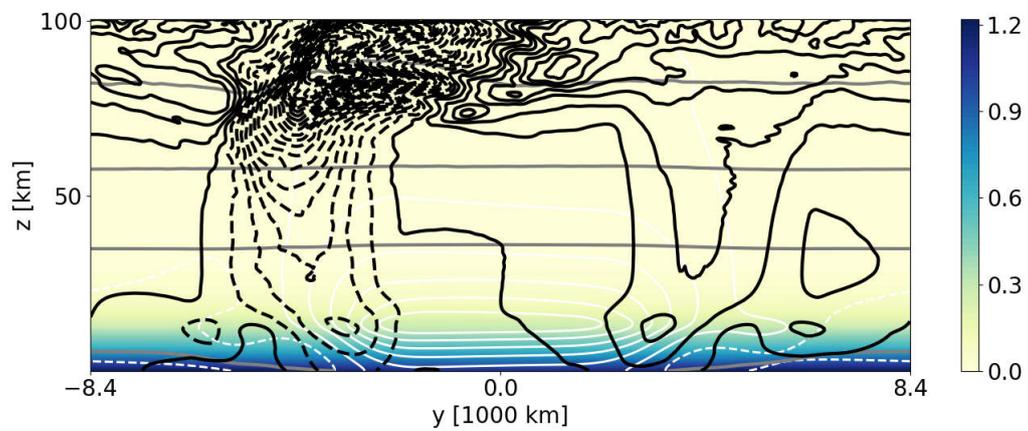


Abbildung E.1: Es sind die gleichen Größen wie in Abbildung 4.1 an Tag 20 um 00:00UTC für den Anwendungstestfall idealisierter barokliner Lebenszyklen mit Limiterfunktion gezeigt, jedoch kennzeichnen die schwarze Konturen zonale Windgeschwindigkeiten zwischen $[-417.86, 156.15] \text{ m s}^{-1}$ mit einem Konturintervall von 20 m s^{-1} . Negative Werte sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

Literaturverzeichnis

- Achatz, U., R. Klein, und F. Senf (2010). Gravity waves, scale asymptotics and the pseudo-incompressible equations. *Journal of Fluid Mechanics* 663, 120–147.
- Achatz, U., B. Ribstein, F. Senf, und R. Klein (2017). The interaction between synoptic-scale balanced flow and a finite-amplitude mesoscale wave field throughout all atmospheric layers: weak and moderately strong stratification. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 143, 342–361.
- Alexander, M. J. und K. H. Rosenlof (1996). Nonstationary gravity wave forcing of the stratospheric zonal mean wind. *Journal of Geophysical Research* 101, 465–474.
- Almgren, A. S. (2000). A new look at the pseudo-incompressible solution to lamb’s problem of hydrostatic adjustment. *Journal of the Atmospheric Sciences* 57, 995–998.
- Almgren, A. S., J. B. Bell, A. Nonaka, und M. Zingale (2008). Low Mach Number Modeling of Type Ia Supernovae. III. Reactions. *The Astrophysical Journal* 684, 449–470.
- Almgren, A. S., J. B. Bell, C. A. Rendleman, und M. Zingale (2006). Low Mach Number Modeling of Type Ia Supernovae. I. Hydrodynamics. *The Astrophysical Journal* 637, 922–936.
- Amiramjadi, M., A. R. Mohebalhojeh, M. Mirzaei, C. Zülicke, und R. Plougonven (2020). The Spatiotemporal Variability of Nonorographic Gravity Wave Energy and Relation to Its Source Functions. *Monthly Weather Review* 148, 4837–4857.
- Andrews, D. G., J. R. Holton, und C. B. Leovy (1987). *Middle Atmosphere Dynamics*. Academic Press.
- Arakawa, A. und V. R. Lamb (1977). Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. *Methods in Computational Physics* 17, 173–265.

- Baldwin, M. P., B. Ayarzagüena, T. Birner, N. Butchart, A. H. Butler, A. J. Charlton-Perez, D. I. V. Domeisen, C. I. Garfinkel, H. Garny, E. P. Gerber, M. I. Hegglin, U. Langematz, und N. M. Pedatella (2021). Sudden stratospheric warmings. *Reviews of Geophysics* 59, e2020RG000708.
- Baldwin, M. P., L. J. Gray, T. J. Dunkerton, K. Hamilton, P. H. Haynes, W. J. Randel, J. R. Holton, M. J. Alexander, I. Hirota, T. Horinouchi, D. B. A. Jones, J. S. Kinnersley, C. Marquardt, K. Sato, und M. Takahashi (2001). The quasi-biennial oscillation. *Reviews of Geophysics* 39, 179–229.
- Bannon, P. (1996). On the anelastic approximation for a compressible atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences* 53, 3618–3628.
- Batchelor, G. (1953). The conditions for dynamical similarity of motions of a frictionless perfect-gas atmosphere. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 79, 224–235.
- Benacchio, T. (2014). *A blended semi-implicit numerical model for weakly compressible atmospheric dynamics*. Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin.
- Benacchio, T. und R. Klein (2019). A Semi-Implicit Compressible Model for Atmospheric Flows with Seamless Access to Soundproof and Hydrostatic Dynamics. *Monthly Weather Review* 147, 4221–4240.
- Benacchio, T., W. P. O’Neill, und R. Klein (2014). A Blended Soundproof-to-Compressible Numerical Model for Small- to Mesoscale Atmospheric Dynamics. *Monthly Weather Review* 142, 4416–4438.
- Bonaventura, L. (2000). A Semi-implicit Semi-Lagrangian Scheme Using the Height Coordinate for a Nonhydrostatic and Fully Elastic Model of Atmospheric Flows. *Journal of Computational Physics* 158, 186–213.
- Borchert, S., U. Achatz, und M. Fruman (2014). Gravity wave emission in an atmosphere-like configuration of the differentially heated rotating annulus experiment. *Journal of Fluid Mechanics* 758, 287–311.
- Botta, N., R. Klein, S. Langenberg, und S. Lützenkirchen (2004). Well balanced finite volume methods for nearly hydrostatic flows. *Journal of Computational Physics* 196, 539–565.

- Boussinesq, J. (1903). *Théorie analytique de la chaleur mise en harmonie avec la thermodynamique et avec la théorie mécanique de la lumière*. Vol. 2. Gauthier-Villars.
- Bölöni, G., B. Ribstein, J. Muraschko, C. Sgoff, J. Wei, und U. Achatz (2016). The Interaction between Atmospheric Gravity Waves and Large-Scale Flows: An Efficient Description beyond the Nonacceleration Paradigm. *Journal of the Atmospheric Sciences* 73, 4833–4852.
- Chew, R., T. Benacchio, G. Hastermann, und R. Klein (2021). Balanced local data assimilation with a blended numerical mode. *Monthly Weather Review* (eingereicht), arXiv:2103.11861.
- Courant, R., K. Friedrichs, und H. Lewy (1928). Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische Annalen* 100, 32–74.
- Cullen, M. J. P. (2007). Modelling atmospheric flows. *Acta Numerica* 16, 67–154.
- Dahmen, W. und A. Reusken (2006). *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer, Berlin.
- Davies, T., A. Staniforth, N. Wood, und J. Thuburn (2003). Validity of anelastic and other equation sets as inferred from normal-mode analysis. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 129, 2761–2775.
- de la Cámara, A. und F. Lott (2013). A parameterization of gravity waves emitted by fronts and jets. *Geophysical Research Letters* 42, 2071–2078.
- Durrán, D. (1989). Improving the Anelastic Approximation. *Journal of the Atmospheric Sciences* 46, 1453–1461.
- Durrán, D. (2008). A physically motivated approach for filtering acoustic waves from the equations governing compressible stratified flow. *Journal of Fluid Mechanics* 601, 365–379.
- Durrán, D. (2010). *Numerical Methods for Fluid Dynamics: With Applications to Geophysics*. Texts in Applied Mathematics. Springer.
- Fritts, D. (1989). A review of gravity wave saturation processes, effects, and variability in the middle atmosphere. *pure and applied geophysics* 130, 343–371.
- Fritts, D. C. und M. J. Alexander (2003). Gravity wave dynamics and effects in the middle atmosphere. *Reviews of Geophysics* 41, 1003.

- Germano, M., U. Piomelli, P. Moin, und W. H. Cabot (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 3, 1760–1765.
- Giraldo, F. X., J. F. Kelly, und E. M. Costantinescu (2013). Implicit-explicit formulations of a three-dimensional nonhydrostatic unified model of the atmosphere (NUMA). *SIAM Journal on Scientific Computing* 35, B1162–B1194.
- Giraldo, F. X. und M. Restelli (2008). A study of spectral element and discontinuous Galerkin methods for the Navier-Stokes equations in nonhydrostatic mesoscale atmospheric modeling: Equation sets and test cases. *Journal of Computational Physics* 227, 3849–3877.
- Hairer, E., C. Lubich, und G. Wanner (2006). *Geometric numerical integration*. Springer, Berlin.
- Held, I. (2005). The Gap between Simulation and Understanding in Climate Modeling. *Bulletin of the American Meteorological Society* 86, 1609–1614.
- Held, I. M. und M. J. Suarez (1994). A Proposal for the Intercomparison of the Dynamical Cores of Atmospheric General Circulation Models. *Bulletin of the American Meteorological Society* 75, 1825–1830.
- Hickel, S., N. Adams, und J. Domaradzki (2006). An adaptive local deconvolution method for implicit LES. *Journal of Computational Physics* 213, 413–436.
- Hien, S. (2018). *Mechanismus der spontanen Schwerewellenabstrahlung im differentiell geheizten rotierenden Annulus und in einem doppeltperiodischen, kartesischen Modellsystem*. Dissertation, Goethe-Universität Frankfurt am Main.
- Hien, S., J. Rolland, S. Borchert, L. Schoon, C. Zuelicke, und U. Achatz (2018). Spontaneous inertia-gravity wave emission in the differentially heated rotating annulus experiment. *Journal of Fluid Mechanics* 838, 5–41.
- Hines, C. (1974). Internal Atmospheric Gravity Waves at Ionospheric Heights. In *The Upper Atmosphere in Motion, C.O. Hines (Ed.)*, 248–328.
- Holton, J. (1982). The Role of Gravity Wave Induced Drag and Diffusion in the Momentum Budget of the Mesosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences* 39, 791–799.
- Holton, J. (1983). The Influence of Gravity Wave Breaking on the General Circulation of the Middle Atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences* 40, 2497–2507.

- Holton, J. (2004). *An Introduction to Dynamic Meteorology*. Elsevier Academic Press.
- Holton, J. R., P. H. Haynes, M. E. McIntyre, A. R. Douglass, R. B. Road, und L. Pfister (1995). Stratosphere-troposphere exchange. *Reviews of Geophysics* 22, 403–439.
- Isaacson, E. und H. B. Keller (1966). *Analysis of numerical methods*. Wiley.
- Jablonowski, C. und D. L. Williamson (2006). A baroclinic instability test case for atmospheric model dynamical cores. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 132, 2943–2975.
- Jebens, S., O. Knoth, und R. Weiner (2009). Explicit two-step peer methods for the compressible Euler equations. *Monthly Weather Review* 137, 2380–2392.
- Kadioglu, S., R. Klein, und M. Minion (2008). A fourth-order auxiliary variable projection method for zero-Mach number gas dynamics. *Journal of Computational Physics* 227, 2012–2043.
- Kemm, F. (2010). A comparative study of TVD-limiters - well-known limiters and an introduction of new ones. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 67, 404–440.
- Kidston, J., A. A. Scaife, S. C. Hardiman, D. M. Mitchell, N. Butchart, M. P. Baldwin, und L. J. Gray (2015). Stratospheric influence on tropospheric jet streams, storm tracks and surface weather. *Nature Geoscience* 8, 433–440.
- Kim, Y., A. C. Bushell, D. R. Jackson, und H. Chun (2013). Impacts of introducing a convective gravity-wave parameterization upon the QBO in the Met Office Unified Model. *Geophysical Research Letters* 40, 1873–1877.
- Kim, Y.-H., H.-Y. Chun, S.-H. Park, I.-S. Song, und H.-J. Choi (2016). Characteristics of gravity waves generated in the jet-front system in a baroclinic instability simulation. *Atmospheric Chemistry and Physics* 16, 4799–4815.
- Kim, Y.-J., S. Eckermann, und H.-Y. Chun (2003). An overview of the past, present and future of gravity wave drag parametrization for numerical climate and weather prediction models. *Atmosphere–Ocean* 41, 65–98.
- Klein, R. (2009). Asymptotics, structure, and integration of soundproof atmospheric flow equations. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 23, 161–195.

- Klein, R. (2010). Scale-dependent models for atmospheric flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 42, 249–274.
- Klein, R. (2011). *On the regime of validity of sound-proof model equations for atmospheric flows*. Proceedings of the ECMWF Workshop on Nonhydrostatic Modelling, Nov 8-10, 2010, in press.
- Klein, R., U. Achatz, D. Bresch, O. Knio, und P. Smolarkiewicz (2010). Regime of validity of soundproof atmospheric flow models. *Journal of the Atmospheric Sciences* 67, 3226–3237.
- Klemp, J. und R. Wilhelmson (1978). The simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *Journal of the Atmospheric Sciences* 35, 1070–1096.
- Klemp, J. B. und D. K. Lilly (1978). Numerical simulation of hydrostatic mountain waves. *Journal of the Atmospheric Sciences* 35, 78–107.
- Kühnlein, C., P. Smolarkiewicz, und P. Dörnbrack (2012). Modelling atmospheric flows with adaptive moving meshes. *Journal of Computational Physics* 231, 2741–2763.
- Lauritzen, P. H., C. Jablonowski, und M. Taylor (2011). *Numerical techniques for global atmospheric models*. Springer.
- Leimkuhler, B. und S. Reich (2004). *Simulating Hamiltonian Dynamics (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics)*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Lilly, D. K. (1992). A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 4, 633–635.
- Lorenz, E. (1955). Available Potential Energy and the Maintenance of the General Circulation. *Tellus* 7, 157–167.
- Marras, S., J. Kelly, M. Moragues, A. Müller, M. A. Kopra, M. Vázquez, F. X. Giraldo, G. Houzeaux, und O. Jorba (2016). A Review of Element-Based Galerkin Methods for Numerical Weather Prediction: Finite Elements, Spectral Elements, and Discontinuous Galerkin. *Archives of Computational Methods in Engineering* 23, 673–722.
- Martin, Z., S.-W. Son, A. Butler, H. Hendon, H. Kim, A. Sobel, S. Yoden, und C. Zhang (2021). The influence of the quasi-biennial oscillation on the madden–julian oscillation. *Nature Reviews Earth & Environment* 2, 477–489.

- McFarlane, N. A. (1989). The effect of orographically excited gravity wave drag on the general circulation of the lower stratosphere and troposphere. *Journal of the Atmospheric Sciences* 44, 1775–1800.
- McIntyre, M. E. und W. Norton (2000). Potential vorticity inversion on a hemisphere. *Journal of the Atmospheric Sciences* 57, 1214–1235.
- McLandress, C. (1998). On the importance of gravity waves in the middle atmosphere and their parameterization in general circulation models. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics* 60, 1357–1383.
- Melvin, T., T. Benacchio, B. Shipway, N. Wood, J. Thuburn, und C. Cotter (2019). A mixed finite-element, finite[U+2010]volume, semi-implicit discretization for atmospheric dynamics: Cartesian geometry. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 145, 2835–2853.
- Mendez-Nunez, L. R. und J. J. Carroll (1994). Application of the MacCormack scheme to atmospheric nonhydrostatic models. *Monthly Weather Review* 122, 984–1000.
- Mengaldo, G., A. Wyszogrodzki, A. Diamantakis, S.-J. Lock, F. X. Giraldo, und N. P. Wedi (2019). Current and Emerging Time-Integration Strategies in Global Numerical Weather and Climate Prediction. *Archives of Computational Methods in Engineering* 26, 663–684.
- Ogura, Y. und N. A. Phillips (1962). Scale Analysis of Deep and Shallow Convection in the Atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences* 19, 173–179.
- O’Neill, W. (2015). *A thermodynamically consistent formulation of the pseudo-incompressible equations for atmospheric modelling with an extension to moist processes*. Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin.
- O’Neill, W. und R. Klein (2014). A moist pseudo-incompressible model. *Atmospheric Research* 142, 133–141.
- O’Sullivan, D. und T. J. Dunkerton (1995). Generation of Inertia–Gravity Waves in a Simulated Life Cycle of Baroclinic Instability. *Journal of the Atmospheric Sciences* 52, 3695–3716.
- Palmer, T. N., G. J. Shutts, und R. Swinbank (1986). Alleviation of a systematic westerly bias in general circulation and numerical weather prediction models through

- an orographic gravity wave drag parametrization. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 112, 1001–1039.
- Plougonven, R. und C. Snyder (2007). Inertia–Gravity Waves Spontaneously Generated by Jets and Fronts. Part I: Different Baroclinic Life Cycles. *Journal of the Atmospheric Sciences* 64, 2502–2520.
- Plougonven, R. und F. Zhang (2014). Internal gravity waves from atmospheric jets and fronts. *Reviews of Geophysics* 52, 33–76.
- Polichtchouk, I. und R. Scott (2020). Spontaneous inertia-gravity wave emission from a nonlinear critical layer in the stratosphere. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 146, 1516–1528.
- Prusa, J., P. Smolarkiewicz, und A. Wyszogrodzki (2008). EULAG, a Computational Model for Multiscale Flows. *Computers & Fluids* 37, 1193–1207.
- Reisner, J., A. Mousseau, A. Wyszogrodzki, und D. Knoll (2005). An implicitly balanced hurricane model with physics-based preconditioning. *Monthly Weather Review* 133, 1003–1022.
- Remmler, S. und S. Hickel (2012). Direct and large eddy simulation of stratified turbulence. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 35, 13–24.
- Remmler, S. und S. Hickel (2013). Spectral structure of stratified turbulence: direct numerical simulations and predictions by large eddy simulation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 27, 319–336.
- Remmler, S., S. Hickel, M. Fruman, und U. Achatz (2015). Validation of large-eddy simulation methods for gravity wave breaking. *Journal of the Atmospheric Sciences* 72, 3537–3562.
- Restelli, M. und F. X. Giraldo (2009). A conservative discontinuous Galerkin semi-implicit formulation for the Navier-Stokes equations in nonhydrostatic mesoscale modeling. *SIAM Journal on Scientific Computing* 31, 2231–2257.
- Rieper, F., S. Hickel, und U. Achatz (2013). A Conservative Integration of the Pseudo-Incompressible Equations with Implicit Turbulence Parameterization. *Monthly Weather Review* 141, 861–886.

- Rodda, C., S. Hien, U. Achatz, und U. Harlander (2020). A new atmospheric-like differentially heated rotating annulus configuration to study gravity wave emission from jets and fronts. *Experiments in Fluids* 61, 2.
- Scaife, A., T. Spanghel, D. R. Fereday, U. Cubasch, U. Langematz, H. Akiyoshi, S. Bekki, P. Braesicke, N. Butchart, M. P. Chipperfield, A. Gettelman, S. C. Hardiman, M. Michou, E. Rozanov, und T. G. Shepherd (2012). Climate change projections and stratosphere-troposphere interaction. *Climate Dynamics* 38, 2089–2097.
- Schemm, S., H. Wernli, und L. Papritz (2013). Warm Conveyor Belts in Idealized Moist Baroclinic Wave Simulations. *Journal of the Atmospheric Sciences* 70, 627–652.
- Schlutow, M. und E. Wahlén (2020). Generalized modulation theory for strongly nonlinear gravity waves in a compressible atmosphere. *Mathematics of Climate and Weather Forecasting* 6, 97–112.
- Schmid, F., E. Gagarina, R. Klein, und U. Achatz (2021). A numerical laboratory for investigations of gravity-wave mean-flow interactions in the atmosphere. *Monthly Weather Review (angenommen)*.
- Shapiro, R. (1970). Smoothing, filtering and boundary effects. *Reviews of Geophysics* 8, 359–387.
- Shapiro, R. (1975). Linear filtering. *Mathematics of Computation* 29, 1094–1097.
- Simmons, A. J., B. J. Hoskins, und D. M. Burridge (1978). Stability of the Semi-Implicit Method of Time Integration. *Monthly Weather Review* 106, 405–412.
- Skamarock, W. und J. Klemp (1992). The Stability of Time-Split Numerical Methods for the Hydrostatic and the Nonhydrostatic Elastic Equations. *Monthly Weather Review* 120, 2109–2127.
- Skamarock, W. und J. B. Klemp (1994). Efficiency and accuracy of the Klemp-Wilhelmson time-splitting technique. *Monthly Weather Review* 122, 2623–2630.
- Smolarkiewicz, P. und A. Dörnbrack (2008). Conservative integrals of adiabatic Durran’s equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 56, 1513–1519.
- Smolarkiewicz, P., C. Kühnlein, und N. Wedi (2014). A consistent framework for discrete integrations of soundproof and compressible PDEs of atmospheric dynamics. *Journal of Computational Physics* 263, 185–205.

- Smolarkiewicz, P., C. Kühnlein, und N. Wedi (2019). Semi-implicit integrations of perturbation equations for all-scale atmospheric dynamics. *Journal of Computational Physics* 376, 145–159.
- Smolarkiewicz, P. und L. G. Margolin (1997). On forward-in-time differencing for fluids: An Eulerian/semi-Lagrangian non-hydrostatic model for stratified flows. *Atmosphere-Ocean* 35, 127–157.
- Smolarkiewicz, P. K., L. G. Margolin, und A. A. Wyszogrodzki (2001). A Class of Nonhydrostatic Global Models. *Journal of the Atmospheric Sciences* 58, 349–364.
- Song, I.-S. und H.-Y. Chun (2008). A Lagrangian spectral parameterization of gravity wave drag induced by cumulus convection. *Journal of the Atmospheric Sciences* 65, 1204–1224.
- Straka, J. M., R. B. Wilhelmson, L. J. Wicker, J. R. Anderson, und K. K. Droegemeier (1993). Numerical solutions of a non-linear density current: A benchmark solution and comparisons. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 17, 1–22.
- Strelnikova, I., M. Almowafy, G. Baumgarten, K. Baumgarten, M. Ern, M. Gerding, und F. Lübken (2021). Seasonal Cycle of Gravity Wave Potential Energy Densities from Lidar and Satellite Observations at 54° and 69°N. *Journal of the Atmospheric Sciences* 78, 1359–1386.
- Tapp, M. und P. White (1976). A non-hydrostatic mesoscale model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 102, 277–296.
- Ullrich, P. und C. Jablonowski (2011). Operator-Split Runge-Kutta-Rosenbrock Methods for Nonhydrostatic Atmospheric Models. *Monthly Weather Review* 140, 1257–1284.
- Van der Vorst, H. (2003). *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics)*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Van der Vorst, H. A. (1992). Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 13, 631–644.
- VanLeer, B. (2006). Upwind and high-resolution methods for compressible flow: From donor cell to residual-distribution schemes. In *16th AIAA Computational Fluid Dy-*

- namics Conf.*, Orlando, FL, pp. 2003–3559. American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA.
- Vanneste, J. (2013). Balance and Spontaneous Wave Generation in Geophysical Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 45, 147–172.
- Viúdez, A. und D. Dritschel (2006). Spontaneous generation of inertia-gravity wave packets by balanced geophysical flows. *Journal of Fluid Mechanics* 553, 107–117.
- Wang, S. und F. Zhang (2007). Sensitivity of Mesoscale Gravity Waves to the Baroclinicity of Jet-Front Systems. *Monthly Weather Review* 135, 670–688.
- Wei, J., G. Bölöni, und U. Achatz (2019). Efficient Modeling of the Interaction of Mesoscale Gravity Waves with Unbalanced Large-Scale Flows: Pseudomomentum-Flux Convergence versus Direct Approach. *Journal of the Atmospheric Sciences* 76, 2715–2738.
- Williams, G. P. (2006). Equatorial Superrotation and Barotropic Instability: Static Stability Variants. *Journal of the Atmospheric Sciences* 63, 1548–1557.
- Williamson, J. (1980). Low-storage Runge-Kutta schemes. *Journal of Computational Physics* 35, 48–56.
- Zhang, F. (2004). Generation of Mesoscale Gravity Waves in Upper-Tropospheric Jet-Front Systems. *Journal of the Atmospheric Sciences* 61, 440–457.

Danksagungen

One, remember to look up at the stars and not down at your feet.

*Two, never give up work. Work gives you meaning
and purpose and life is empty without it.*

*Three, if you are lucky enough to find love,
remember it is there and don't throw it away.*

– Stephen Hawking

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Personen bedanken, die durch ihre fachliche und persönliche Unterstützung zum Gelingen dieser Dissertation beigetragen haben!