
**Unstetige Galerkin-Diskretisierung
niedriger Ordnung in einem
atmosphärischen Multiskalenmodell**

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)
in der Wissenschaftsdisziplin
„Physik der Atmosphäre“

eingereicht an der
**Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Potsdam**

von

Thomas Orgis

Potsdam, den 25. Mai 2014

Dieses Werk ist unter einem Creative Commons Lizenzvertrag lizenziert:
Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International
Um die Bedingungen der Lizenz einzusehen, folgen Sie bitte dem Hyperlink:
<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>

Online veröffentlicht auf dem
Publikationsserver der Universität Potsdam:
URL <http://opus.kobv.de/ubp/volltexte/2014/7068/>
URN <urn:nbn:de:kobv:517-opus-70687>
<http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:kobv:517-opus-70687>

*That is not dead which can eternal lie,
And with strange eons even death may die.*

H.P. Lovecraft

Die zugrunde liegende Arbeit wurde wesentlich am Alfred-Wegener-Institut Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung, Forschungsstelle Potsdam, durchgeführt. Die veröffentlichte Version vom 25. Mai 2014 entspricht inhaltlich der bewerteten Version vom 23. November 2013. Eingeflossene Korrekturen sind in Anhang E aufgeführt.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| 1. Einleitung | 1 |
| 2. Atmosphärische Gleichungssysteme | 3 |
| 2.1. Zur Notation | 4 |
| 2.2. Geometrie im β -Kanal | 4 |
| 2.3. Gleichungen in Flussform | 5 |
| 2.4. Euler-Gleichungen | 6 |
| 2.4.1. Energiegleichung | 6 |
| 2.4.2. Bewegungsgleichungen | 8 |
| 2.4.3. Flussform des gesamten Gleichungssystems | 9 |
| 2.4.4. Schallgeschwindigkeit | 9 |
| 2.4.5. Druck und Energie | 9 |
| 2.4.6. Energie als Erhaltungsvariable | 10 |
| 2.5. Euler-Gleichungen mit Referenzfeld | 10 |
| 2.6. Linearisierte Euler-Gleichungen | 11 |
| 2.7. Flachwassergleichungen | 13 |
| 2.8. Flachwasseräquivalente Dynamik mit Euler-Gleichungen | 13 |
| 3. Unstetiges Galerkin-Verfahren | 13 |
| 3.1. Räumliche Diskretisierung | 14 |
| 3.1.1. Integralform und numerischer Fluss | 14 |
| 3.1.2. Koeffizientendarstellung der Gleichungen | 18 |
| 3.1.3. Koordinatentransformation mit Orographie | 19 |
| 3.1.4. Quadratur | 23 |
| 3.1.5. Basisfunktionen im Rechteckgitter | 24 |
| 3.1.6. Diskretisierung von analytischen Anfangsbedingungen | 25 |
| 3.2. Zeitliche Diskretisierung | 25 |
| 3.2.1. Expliziter Zeitschritt | 26 |
| 3.2.2. Semi-impliziter Zeitschritt | 27 |
| 3.2.3. Skalierung von Einheiten | 29 |
| 3.2.4. Zeitschrittbestimmung | 29 |
| 3.3. Randbedingungen | 31 |
| 3.3.1. Periodische Randbedingungen | 32 |
| 3.3.2. Reflektive Randbedingungen | 32 |
| 3.3.3. Spezifische Randbedingungen für Euler-Gleichungen | 33 |
| 3.3.4. Absorptionsschicht | 33 |
| 3.4. Diffusion | 36 |
| 4. Atmosphärische Gleichgewichtszustände | 38 |
| 4.1. Anforderungen an stationäre Zustände | 38 |
| 4.1.1. Verschwindende Advektion von Masse und potentieller Temperatur | 39 |
| 4.1.2. Stationäre Impulsgleichung | 39 |
| 4.2. Wind ohne Corioliskraft | 41 |
| 4.3. Geostrophischer Wind | 41 |

| | | |
|-----------|--|-----------|
| 4.4. | Vorgegebener Grundstrom mit einstellbarer Baroklinität | 42 |
| 4.4.1. | Lösungsalgorithmus | 45 |
| 4.4.2. | Zulässige Windfelder und ihre Definition außerhalb des Modellgebietes | 47 |
| 4.4.3. | Spezialfall konstanten thermischen Windes | 47 |
| 4.5. | Barotroper Grundstrom als analytischer Spezialfall | 47 |
| 4.6. | Charakterisierung der Baroklinität | 49 |
| 4.7. | Geostrophischer Zustand für Flachwassergleichungen | 50 |
| 5. | Numerische Stabilität von Gleichgewichtszuständen und Erhaltungseigenschaften | 51 |
| 5.1. | Polynomiale Balancierung des DG-Verfahrens | 52 |
| 5.1.1. | Ausgangssituation („low0bal0“) | 52 |
| 5.1.2. | Isotrope Reduktion des Polynomgrades der Quellterme („low1bal0“) | 55 |
| 5.1.3. | Isotrope Polynomgradreduktion von Quelltermen sowie Projektion der Flussfunktion („low1bal1“) | 56 |
| 5.1.4. | Volle Balancierung mit selektiver Polynomgradreduktion und Projektion der Flussfunktion („low2bal1“) | 62 |
| 5.2. | Konvergenz | 65 |
| 5.3. | Langzeitstabilität und Erhaltungseigenschaften | 66 |
| 6. | Atmosphärische Testfälle | 69 |
| 6.1. | Aufsteigende warme Blase | 69 |
| 6.2. | Schwerewellen | 70 |
| 6.3. | Bergüberströmung | 73 |
| 6.4. | Barotrope Instabilität | 75 |
| 7. | Atmosphärische Instabilitäten in mittleren Breiten | 82 |
| 7.1. | Barotrope Instabilität mit Euler-Gleichungen in 2D und 3D | 82 |
| 7.1.1. | Wavelet-Spektrum | 85 |
| 7.2. | Barokline Instabilität in Abhängigkeit von statischer Stabilität und thermischem Wind | 86 |
| 7.2.1. | Einfluss der statischen Stabilität | 90 |
| 7.2.2. | Einfluss der vertikalen Diskretisierung | 92 |
| 7.3. | Entstehung zyklonaler Wirbel aus baroklin instabilem Grundstrom | 95 |
| 7.3.1. | Konfiguration | 95 |
| 7.3.2. | Entwicklung von Impulsdifferenz | 98 |
| 7.3.3. | Vorticity im Horizontalschnitt | 99 |
| 7.3.4. | Globale Charakterisierung | 99 |
| 7.4. | Langzeitentwicklung aus baroklinen Zuständen | 103 |
| 7.4.1. | Konfiguration | 103 |
| 7.4.2. | Entwicklung von Impulsdifferenz und Energie | 105 |
| 7.4.3. | Vorticity im Horizontalschnitt | 107 |
| 7.4.4. | Globale Charakterisierung | 112 |
| 7.4.5. | Wavelet-Spektrum | 113 |
| 7.4.6. | Zonales Mittel | 114 |

| | |
|---|------------|
| 8. Zusammenfassung und Ausblick | 117 |
| A. Mathematische Aspekte | 119 |
| A.1. Profilkfunktionen | 119 |
| A.2. Differenzen und Normen | 122 |
| A.3. Wavelet-Analyse | 123 |
| A.4. Darstellung aus der Diskretisierung | 124 |
| A.5. Erhaltungseigenschaften mit Quadratur | 125 |
| B. Details zu Euler-Gleichungen | 126 |
| B.1. Vertikale Linearisierung der Euler-Gleichungen für Prakon- semi-impliziten Zeitschrittes | 126 |
| B.1.1. Vertikales lineares Gleichungssystem | 127 |
| B.1.2. Diskretisierung und Matrizen | 127 |
| B.1.3. Implizites Gleichungssystem | 135 |
| B.2. Zustande im hydrostatischen Gleichgewicht | 137 |
| B.2.1. Isotherm | 138 |
| B.2.2. Polytrop | 138 |
| B.2.3. Isentrop | 138 |
| B.2.4. Mehrfach polytrop | 139 |
| B.2.5. Uniform geschichtet | 139 |
| B.3. Barokliner Zustand im p -System | 140 |
| C. Zusatzliche Simulationsdaten | 141 |
| C.1. Stabilitatskarten zu baroklinen Langzeitsimulationen | 141 |
| C.2. Wirbelentstehung nahe Oberrand | 141 |
| C.3. Zusatzliche Horizontalschnitte des baroklinen Langzeitlaufes | 142 |
| D. Implementierung: Programmpaket Polyflux | 147 |
| E. Korrekturen zur Veroffentlichung | 148 |
| Mathematische Definitionen | 149 |
| Abkurzungen und Begriffe | 155 |
| Literatur | 157 |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|--|----|
| 3.1. Element im Modellgebiet | 15 |
| 3.2. Beispiel DG-Diskretisierung in 1D | 16 |
| 3.3. Koordinatentransformation | 20 |
| 3.4. Eindimensionale Basisfunktionen | 25 |
| 3.5. Entwicklung von adaptivem Zeitschritt | 31 |
| 3.6. Entwicklung von adaptivem Zeitschritt | 32 |
| 3.7. Randbedingungen im Flachwassermodell | 34 |
| 3.8. Starke der Absorptionsschicht | 36 |

| | |
|--|-----|
| 3.9. Randbedingungen im Flachwassermodell mit Absorption | 37 |
| 4.1. Barokliner Zustand mit lokalisiertem Jet | 46 |
| 4.2. Geostrophischer Flachwasserzustand | 51 |
| 5.1. Hydrostatisches Gleichgewicht ohne Balancierung: Abweichung | 54 |
| 5.2. Hydrostatisches Gleichgewicht ohne Balancierung: Vertikalwind | 57 |
| 5.3. Hydrostatisches Gleichgewicht mit Quellterm-Projektion: Abweichung | 57 |
| 5.4. Hydrostatisches Gleichgewicht mit Quellterm-Projektion: Vertikalwind | 58 |
| 5.5. Hydrostatisches Gleichgewicht mit Quell- und Flussprojektion | 58 |
| 5.6. Temperaturverläufe der hydrostatischen Säulen | 60 |
| 5.7. Hydrostatisches Gleichgewicht für verschiedene Zustände | 61 |
| 5.8. Langzeitentwicklung der Hydrostatik mit voller Balancierung | 61 |
| 5.9. Grundstromprofil für barotrope Balancierung | 63 |
| 5.10. Vereinfachte Kanalgeometrie für geostrophisches Gleichgewicht | 63 |
| 5.11. Geostrophisches Gleichgewicht und selektive Balancierung | 64 |
| 5.12. Konvergenz des Quasi-1D-Kanals | 66 |
| 5.13. Konvergenz des quasi-zweidimensionalen 3D-Kanals | 66 |
| 5.14. Gleichgewicht im quasi-2D-3D-Kanal: Dichte- und Impulsfehler | 68 |
| 5.15. Gleichgewicht im quasi-2D-3D-Kanal: Erhaltungseigenschaften | 68 |
| 6.1. Aufsteigende Blase, Variante 1 | 71 |
| 6.2. Aufsteigende Blase, Variante 2 | 71 |
| 6.3. Aufsteigende Blase, Variante 2: Vertikalschnitt | 71 |
| 6.4. Schwerewellen-Vergleich mit explizitem und implizitem Zeitschritt | 72 |
| 6.5. Lineare Bergüberströmung | 74 |
| 6.6. Nichtlineare Bergüberströmung | 76 |
| 6.7. Startzustand für Galewsky-Testfall | 77 |
| 6.8. Galewsky-Testfall, Vergleich ohne Diffusion | 78 |
| 6.9. Konvergenzordnung im Galewsky-Testfall | 79 |
| 6.10. Galewsky-Testfall: Konvergenz in der Vorticity | 80 |
| 6.11. Diffusion im Galewsky-Testfall | 81 |
| 7.1. Barotrope Instabilität von verschiedenen Windprofilen | 83 |
| 7.2. Barotrope Instabilität in 2D und 3D mit Euler-Gleichungen | 84 |
| 7.3. Barotrope Instabilität in 3D mit Euler-Gleichungen | 85 |
| 7.4. Wavelet-Spektrum der barotropen Instabilität | 86 |
| 7.5. Schema der Simulationen zur baroklinen Instabilität | 88 |
| 7.6. Störungswachstum bei barokliner Stabilitätsstudie | 89 |
| 7.7. Barokline Instabilitätskarten | 91 |
| 7.8. Barokline Instabilitätskarten mit verschiedener Vertikalstruktur | 93 |
| 7.9. Isolinien barokliner Stabilität im Vergleich | 94 |
| 7.10. Barokline Instabilitätskarte mit konstantem Durchschnittswind | 95 |
| 7.11. Anfangszustand der Wirbelentstehung | 97 |
| 7.12. Wirbelentwicklung: Zeitreihen der Impulsstörung | 98 |
| 7.13. Wirbelentwicklung aus Wellenpaket auf 1 km Höhe | 100 |
| 7.14. Wirbelentwicklung aus Rauschen auf 1 km Höhe | 101 |
| 7.15. Wirbelentwicklung aus Wellenpaket, Druck und Temperatur | 102 |
| 7.16. Wirbelentwicklung: Zeitreihen von Kenngrößen der Baroklinität bzw. Instabilität | 103 |
| 7.17. Barokline Langzeitläufe: Zeitreihen des Impulsabweichung | 106 |

| | |
|---|-----|
| 7.18. Barokline Langzeitläufe: Energieerhaltung | 106 |
| 7.19. Vorticity des Langzeitlaufes mit unterkritischem thermischen Wind | 108 |
| 7.20. Vorticity des Langzeitlaufes mit mittlerem thermischen Wind | 109 |
| 7.21. Vorticity des Langzeitlaufes mit großem thermischen Wind | 110 |
| 7.22. Vorticity des Langzeitlaufes mit großem thermischen Wind | 111 |
| 7.23. Langzeitläufe: Zeitreihen von Kenngrößen der Baroklinität bzw. Instabilität | 112 |
| 7.24. Wavelet-Spektrum der baroklinen Instabilität | 114 |
| 7.25. Abbau des Temperaturgradienten durch barokline Instabilität | 115 |
| 7.26. Zonalmittel bei barokliner Instabilität | 116 |
| | |
| A.1. Morlet-Wavelet | 123 |
| A.2. Unstetige Darstellung und Vortäuschung von Trends | 124 |
| | |
| C.1. Barokline Instabilitätskarten passend zu Langzeitsimulationen | 142 |
| C.2. Wirbelentwicklung aus Wellenpaket auf 4 km Höhe | 143 |
| C.3. Wirbelentwicklung aus Rauschen auf 4 km Höhe | 144 |
| C.4. Vorticity des Langzeitlaufes mit großem thermischen Wind | 145 |
| C.5. Vorticity des Langzeitlaufes mit großem thermischen Wind | 146 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|--|-----|
| 3.1. Knoten und Gewichte für die Gauß-Quadratur | 23 |
| 3.2. Stützpunkte zu den wichtigen eindimensionalen Basen bis $k = 2$ | 24 |
| 3.3. Runge-Kutta-Koeffizienten | 27 |
| 3.4. Koeffizienten für BDF2A | 28 |
| | |
| 5.1. Konfiguration zum hydrostatischen Gleichgewicht | 54 |
| 5.2. Konfiguration zum barotropen Gleichgewicht | 63 |
| | |
| 7.1. Konfiguration zur barotropen Instabilität | 83 |
| 7.2. Konfiguration zur baroklinen Instabilität | 87 |
| 7.3. Schichtung in barokliner Sensitivitätsstudie | 88 |
| 7.4. Konfiguration zur Wirbelentwicklung | 96 |
| 7.5. Konfiguration zu baroklinen Langzeitläufen | 104 |
| 7.6. Wind-Eigenschaften der baroklinen Langzeitläufe | 104 |
| | |
| A.1. Profilkfunktionen mit Ableitungen | 121 |
| A.2. Profile mit Integralen | 121 |

1. Einleitung

Die Dynamik der Atmosphäre der Erde ist geprägt von Prozessen auf verschiedenen räumlichen und zeitlichen Skalen. Diese reichen von mikrophysikalischer Turbulenz über konvektive Prozesse und Wolkenbildung bis zu synoptischen und planetaren Wellen. Für Wettervorhersage auf Tages- und Wochenskalen und zur Betrachtung des Klimas über Jahrzehnte und Jahrhunderte sind diese Gegenstand der Modellierung mit numerischen Verfahren. Die verfügbare Rechentechnik beschränkt dabei die Größe der diskretisierten Modellzustände, somit die Feinheit der Auflösung globaler Modelle (GCM für General Circulation Model) wie ECHAM6 (Stevens et al., 2013) beziehungsweise die Ausdehnung von feiner aufgelösten regionalen Modellen (RCM für Regional Climate Model) wie HIRHAM (Dethloff et al., 1996) bis hin zu Modellen, welche die Dynamik von Wolken auflösen (CRM für Cloud Resolving Model), Wu und Li (2008)).

Die Entwicklung der Rechentechnik ermöglicht allerdings immer feinere Auflösung, so dass kommende Generationen von GCMs in Bereiche vorstoßen, die eine Neuformulierung der auf der hydrostatischen Näherung basierenden dynamischen Kerne erfordern. Der dynamische Kern eines Modells besteht in der Diskretisierung und Zeitintegration der grundlegenden dynamischen Gleichungen für die Entwicklung von Masse, Energie und Impuls. Bei Auflösung von Strukturen unter 10 km in der Horizontalen ist die hydrostatische Näherung, wie sie aktuellen Modellen — insbesondere solchen für globale Anwendungen — zugrunde liegt, nicht mehr gültig und es müssen nichthydrostatische Prozesse betrachtet werden.

Flexible atmosphärische Gitter mit adaptiver Auflösung könnten die Einbettung von regionalen Modellen wie HIRHAM mit nur einseitiger Einwirkung der globalen Dynamik auf das Regionalmodell durch beidseitige Wechselwirkung in einem einheitlichen Modell mit regional verschiedener Auflösung ersetzen. Damit kann auch die Rückwirkung der feiner aufgelösten regionalen Dynamik auf globale Prozesse untersucht werden. Generell erlaubt die Erhöhung der Auflösung numerischer Modelle genauere Simulation von physikalischen Prozessen und reduziert den Bereich der atmosphärischen Prozesse, die für realistische Ergebnisse durch Parametrisierung dargestellt werden müssen (Arakawa, 2004; Rummukainen, 2010).

Es gibt eine Vielzahl von numerischen Verfahren für die kommende Generation von nichthydrostatischen Modellen für globale und regionale Anwendung, die durch die neuen Anforderungen Vorteile ausspielen können bzw. durch diese konkurrenzfähig werden. Auch Verfahren mit vergleichsweise hohem prinzipiellen Rechenaufwand können durch bessere Parallelisierbarkeit in der Summe effizienter sein als einfachere Verfahren (Giraldo, 2005; Giraldo, Restelli und Läuter, 2010; Kelly und Giraldo, 2012).

Eine Klasse von Verfahren, die verschiedene wünschenswerte Eigenschaften auf sich vereinen, bilden die unstetigen Galerkin-Verfahren, kurz DG („Discontinuous Galerkin“). Der ursprünglichen Einführung von Reed und Hill (1973) und maßgeblicher Weiterentwicklung (siehe Cockburn, 1998) folgten atmosphärische Anwendungen. Es gibt verschiedene Ansätze für globale Flachwassermodelle mit Ikosaedergitter (Giraldo, Hesthaven et al., 2002), „cubed sphere“ (Nair et al., 2005) und einem allgemeinen Dreieckgitter (Läuter et al., 2008). Weiterhin wenden Giraldo und Restelli (2008) (auch Giraldo, Restelli und Läuter, 2010) das DG-Verfahren auf die Euler-Gleichungen in einer mesoskaligen x - z -Konfiguration an. Kelly und Giraldo (2012) demonstrieren einen

Ansatz für ein dreidimensionales Atmosphärenmodell.

Wesenszug der DG-Verfahren ist eine Unterteilung des Modellgebietes in Elemente, in denen die Zustandsvariablen durch eine polynomiale Basis dargestellt sind. An den Elementgrenzen kann diese Darstellung Unstetigkeiten aufweisen. Zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung innerhalb eines Elementes werden neben der Darstellung in diesem nur Austauschsterme mit den direkten Nachbarn benötigt. Die Geometrie dieser Elemente ist grundsätzlich frei und vor allem bis auf die gemeinsamen Grenzflächen unabhängig voneinander.

Eine Grundeigenschaft der DG-Verfahren ist die Erhaltung von Integralen der Variablen, mit denen der dynamische Kern formuliert ist (z.B. Massendichte als Variable und folglich globale Massenerhaltung). Der Ansatz mit einer lokalen Basis von Polynomen bietet mit der Wahl hoher Polynomgrade die Möglichkeit hoher Konvergenzordnung. Gängige Ansätze der Anwendung auf atmosphärische Dynamik setzen auch auf diese Eigenschaft (z.B. Giraldo und Restelli, 2008).

Die vorliegende Arbeit untersucht die Eignung der DG-Verfahren niedriger Ordnung, im Wesentlichen einer Verallgemeinerung von Finite-Volumen-Verfahren mit linearen oder quadratischen Polynomen, für atmosphärische Anwendungen. Die Anwendbarkeit der von Cockburn (1998) für homogene Differentialgleichungen beschriebenen Theorie auf ein System, das Wirkungen von externen Kräften wie Erdanziehungskraft und Corioliskraft beinhaltet (heterogene Differentialgleichungen), ist nicht selbstverständlich. Die Erkenntnisse zum Verfahren niedriger Ordnung mit exakter Integration könnten einerseits Einblick in auch für höhere Ordnungen relevante Stabilitätseigenschaften liefern. Andererseits könnte der resultierend formulierte dynamische Kern auch selbst für die Anwendung in Atmosphärenmodellen in Frage kommen.

Vor der Beschreibung des numerischen Verfahrens beginnt die vorliegende Arbeit in Kap. 2 mit der Aufstellung der behandelten dreidimensionalen Euler-Gleichungen für den β -Kanal in der benötigten Flussform sowie mit Bezug auf ein Gleichgewichts-Referenzfeld und in Linearisierung. Der betrachtete β -Kanal ist eine Näherung an die atmosphärische Dynamik bei mittlerer geographischer Breite (um 45°N) und beinhaltet wichtige dreidimensionale Prozesse inklusive der Wirkung der Corioliskraft in einfachen kartesischen Koordinaten. Ebenfalls finden die Flachwassergleichungen als zweidimensionale Vereinfachung Erwähnung. Die Basis des Verfahrens wird in Kap. 3 als selbstständige Beschreibung des aus der Schilderung von Cockburn (1998) folgenden und um semi-implizite Zeitintegration erweiterten Verfahrens in nachvollziehbarer Weise dargestellt.

Als Voraussetzung für Simulationen widmet sich Kap. 4 der Aufstellung von Gleichgewichtszuständen im z -System, welche als Referenzzustand beziehungsweise Anfangszustand Verwendung finden. Hervorzuheben ist hierbei die nichttriviale Bestimmung von Zuständen in geostrophischem Gleichgewicht mit durch Vorgabe eines Grundstromprofils einstellbarer Barokliniät, die durch numerische Lösung der thermischen Windgleichung mittels der Charakteristikenmethode erreicht wird.

Die Aufstellung des DG-Verfahrens wird durch Betrachtungen zu atmosphärischen Gleichgewichten in Kap. 5 komplettiert. Es erfolgen Modifikationen der Diskretisierung, die das Modell stabilisieren und auch unerwünschte Unstetigkeiten eindämmen. Kern ist die Angleichung von Polynomgraden zwischen verschiedenen Termen innerhalb der Auswertung der Diskretisierung, ohne externe Filter wie Slope Limiter (Leer, 1977; Leer, 1979) zu bemühen. Die Erhaltungseigenschaften und die Konvergenzordnung werden experimentell bestätigt.

Das vollständige Verfahren findet in Kap. 6 Anwendung auf verschiedene Testfälle aus der Literatur. Enthalten sind Simulationen zur konvektiven Entwicklung einer erwärmten

Blase (Robert, 1993), mesoskalige Simulationen zur Ausbreitung von Schwerewellen aus einer Störung der potentiellen Temperatur (Skamarock und Klemp, 1994) und Anregung von Wellen aus der Überstömung von Bergen (Pinty et al., 1995) sowie schließlich planetare Wellenentwicklung aus barotroper Instabilität in Anpassung des für die Sphäre gegebenen Testfalles (Galewsky et al., 2004) auf den β -Kanal.

Für die Frage der Eignung des Verfahrens für atmosphärische Anwendung, insbesondere bezüglich der Stabilität von Gleichgewichten, spielt die für DG an anderer Stelle demonstrierte Adaptivität u.a. mit Dreieckgittern (Cockburn, 1998) eine untergeordnete Rolle, wird aber in einfacher Form als Verformung eines Rechteckgitters eingebunden und in einem mesoskaligen Anwendungsfall zusammen mit der Darstellung von Orographie demonstriert (Abs. 6.3). Ebenso genügt für die Simulation idealisierter atmosphärischer Bedingungen bis hin zur Entwicklung barokliner Instabilität die vereinfachte Geometrie des β -Kanals.

Ausgehend vom zweidimensionalen Testfall der barotropen Instabilität führt Kap. 7 dreidimensionale Modellkonfigurationen ein, die für die weitere Charakterisierung der barotropen Instabilität und folgend für die detaillierte Charakterisierung barokliner Instabilität eingesetzt werden. Der in Abs. 4.4 aufgestellte Gleichgewichtszustand mit einstellbarer Baroklinität dient der Erstellung von Stabilitätsdiagrammen in Abs. 7.2, welche die Stärke der Entwicklung einer kleinen Störung des Gleichgewichtes in Bezug zur statischen Stabilität und Baroklinität des Grundzustandes erfassen. Diese werden im Vergleich zur Analyse des Zwei-Schichten-Modells aus Etling (2008) diskutiert.

Eine Detailstudie eines sich aus barokliner Instabilität entwickelnden zyklonalen Wirbels aus geordneter oder ungeordneter Störung folgt in Abs. 7.3. Den Abschluss bildet die Analyse der Langzeitdynamik gestörter Grundströmungen mit unterschiedlicher Baroklinität (Abs. 7.4) mit Blick auf die Entwicklung von Wellenmustern und globalen Kennzahlen der Baroklinität sowie der Betrachtung von Erhaltungseigenschaften als Komplement zu den Gleichgewichtssimulationen in Kap. 5.

2. Atmosphärische Gleichungssysteme

Hauptsächlicher Gegenstand der Modellierung in der vorliegenden Arbeit sind die Euler-Gleichungen als vereinfachte Beschreibung der Dynamik einer trockenen Atmosphäre. Betrachtet wird das volle System aus Massenerhaltung, Impulserhaltung und einer Form des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik, welcher in engem Bezug zur Erhaltung der Gesamtenergie des Systems steht. Die genaue Form dieser Beziehung hängt davon ab, welche zugeordnete Variable als Erhaltungsgröße in der Flussform gewählt wird. Die Flussform der Gleichungen ist die Darstellung, für die das in dieser Arbeit vorgestellte numerische Lösungsverfahren formuliert ist.

Das System der Euler-Gleichungen wird in verschiedenen Varianten verwendet, deren Darstellung und Herleitung in diesem Kapitel dokumentiert ist. Gleiches gilt für die Flachwassergleichungen, welche als vereinfachtes System für die Untersuchung der horizontalen Dynamik nützlich sind. Zum besseren Verständnis beginnt die Betrachtung jeweils mit einer Verknüpfung der Gleichungen in der benötigten Flussform mit den klassisch formulierten Erhaltungsgesetzen und entwickelt dann die verschiedenen genutzten Varianten.

Es kommt die Geometrie des β -Kanals als Näherung der Dynamik mittlerer Breiten zum Einsatz. Dies erlaubt die Behandlung atmosphärischer Prozesse bis hin zur Wechsel-

wirkung von Corioliskraft und Erdanziehungskraft in einfachen kartesischen Koordinaten. Die stabile Behandlung der Dynamik im β -Kanal ist eine Voraussetzung, die eine für regionale und globale Anwendungen konzipierte numerische Methode zur Lösung der atmosphärischen Gleichungen zu erfüllen hat.

2.1. Zur Notation

Um die mathematische Beschreibung verständlich zu gestalten und Konflikte von Bezeichnungen zu minimieren, kommt eine Notation zum Einsatz, die klar Vektoren \vec{q} (Pfeil über dem Symbol) von Matrizen \overline{f} oder \overline{M} (horizontale Linien über und unter dem Symbol zur Andeutung eines rechteckigen Rahmens in Bezug zur zweidimensionalen Struktur einer Matrix) und einfachen Skalaren s trennt. Koeffizientenvektoren einer Basisdarstellung werden durch die Darstellung \vec{q} von räumlichen Vektoren oder denen von Systemvariablen unterschieden. Wiederkehrende Symbole und Operatoren sind am Ende des Dokumentes (Seite 149) zusammen aufgelistet.

Es werden SI-Einheiten benutzt. Die Bezeichnung der in Diagrammen dargestellten Größen erfolgt in Form von Division einer Größe durch ihre Einheit, wodurch die dimensionslosen Zahlen an der Achse als Ergebnis der zugeordneten Gleichung gesehen werden können. Verwendet wird beispielsweise „ x/km “, um auszudrücken, dass die dargestellten Zahlen den Ort x in Kilometern angeben.¹

2.2. Geometrie im β -Kanal

Der β -Kanal besteht in der Festlegung auf kartesische Grundgeometrie auf einer Tangentialebene zur Erdoberfläche (Etling, 2008, S. 152), mit horizontalen Koordinaten x (zonal, positiv nach Osten) und y (meridional, positiv nach Norden) sowie Vertikalkoordinate z (positiv von der Erdoberfläche weg). Der Coriolissterm mit Erdrotationsvektor $\vec{\Omega}_p$ und Windvektor \vec{u} in den Gleichungen wird auf die horizontale Komponente entsprechend

$$2\vec{\Omega}_p \rightarrow f_c \vec{k} \quad (2.1)$$

reduziert. Der horizontalen Coriolisparameter

$$f_c(y) = f_0(\phi_0) + \beta y \quad (2.2)$$

ist als lineare Funktion der meridionalen Koordinate y um den Basiswert

$$f_0(\phi_0) = 2\Omega_p \sin \phi_0 \quad (2.3)$$

bei der geographischen Breite ϕ_0 und der y -Ableitung

$$\beta = \frac{2\Omega_p}{R_p} \cos \phi_0 \quad (2.4)$$

(darin Planetenradius $R_p = 6370 \text{ km}$) genähert. Im β -Kanal ist der der normierte Vertikalvektor \vec{k} konstant

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

¹ Dies entspricht der Norm DIN 1313 und ebenfalls einer Empfehlung des US-amerikanischen National Institute of Standards and Technology (Thompson und Taylor, 2008) und ist äquivalent zu der im anglo-amerikanischen Raum üblichen Schreibweise „ $x \text{ (km)}$ “ oder auch den Varianten „ $x \text{ [km]}$ “ und „ x in km “.

weist also nur eine Komponente in z -Richtung auf.

Die geographische Breite des Kanalmittelpunktes ist für diese Arbeit auf

$$\phi_0 = 45^\circ \text{N} \quad (2.6)$$

gesetzt, entsprechend der Anwendung auf die Dynamik mittlerer Breiten auf der Nordhalbkugel.

Für den Einsatz in verschiedenen Modellkonfigurationen ist auch bei den Gleichungssystemen die Anzahl der räumlichen Dimensionen flexibel zwischen eins (1D) und drei (3D) gehalten. So können in detaillierten Experimenten in der Kanalgeometrie das hydrostatische oder auch das geostrophische Gleichgewicht isoliert betrachtet und auch verschiedene Testfälle in zwei Dimensionen nachgebildet werden. Der dreidimensionale Koordinatenvektor wird dazu jeweils passend auf die betrachteten Komponenten reduziert. Möglichkeiten sind

$$\vec{x}_{3D} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \vec{x}_{1D,z} = (z), \quad \vec{x}_{2D,xy} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \vec{x}_{2D,xz} = \begin{pmatrix} x \\ z \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Die Formulierung der Gleichungen erfolgt grundsätzlich für 3D und bezieht sich in der Anwendung auf den jeweiligen Subraum. Bezüglich physikalischer Dimensionen der Feldgrößen gilt dabei die Festlegung, dass Dichten immer für 3D definiert sind, also pro Kubikmeter in SI-Einheiten. Ein Integral einer Massendichte über den eindimensionalen Raum ergibt dann keine Masse, sondern eine Flächendichte dieser. Wenn mit einer der eindimensionalen Welt in 3D zugeordneten Grundfläche multipliziert wird, erhält man eine Masse. Eine eindimensionale Luftsäule hat so z.B. das Masseintegral $\int \rho dz = 1 \cdot 10^5 \text{ kg/m}^2$, welches direkt mit der normalen Definition eines Bodendruckes in der Größenordnung von 1000 hPa korreliert. Auch der Druck bleibt unabhängig von den Raumdimensionen als Kraft pro zweidimensionaler Fläche definiert.

2.3. Gleichungen in Flussform

Die in dieser Arbeit betrachtete unstetige Galerkin-Diskretisierung ist allgemein für Erhaltungsgesetze formuliert, welche in der Flussform, auch Erhaltungsform bzw. englisch „conservation form“ genannt, dargestellt sind. Der Prototyp dafür ist die Massenerhaltung ohne Quellen und Senken (Etling, 2008, Gl. 8.2),

$$\partial_t \rho + \overleftrightarrow{\nabla}(\rho \vec{u}) = 0, \quad (2.8)$$

mit Dichte ρ und Windvektor \vec{u} . Ein System von Gleichungen ergibt sich, wenn für einen Vektor \vec{q} von verschiedenen konservativen Variablen eine Flussfunktion bzw. Flussmatrix $\overline{f}(\vec{q})$ eingeführt wird. Das allgemeine homogene Gleichungssystem hat dann die analoge Form

$$\partial_t \vec{q} + \overleftrightarrow{\nabla} \overline{f}(\vec{q}) = 0. \quad (2.9)$$

Die Flussmatrix ist dabei so definiert, dass ihre Divergenz einen Vektor entsprechend den Variablen q_i ergibt, dessen Komponenten jeweils die skalare Divergenz des Flussvektors \vec{f}_i zur Variablen q_i beinhalten. Mit n Raumdimensionen und m Systemvariablen ist

f_{ij} der Fluss der Variablen q_i in Raumrichtung j und im Gesamtbild ergibt sich

$$\underline{\underline{f}}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} f_{11} & \cdots & f_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ f_{m1} & \cdots & f_{mn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{f}_1^T \\ \vdots \\ \vec{f}_m^T \end{pmatrix}; \quad \overleftrightarrow{\nabla} \underline{\underline{f}} = \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{\nabla} \vec{f}_1 \\ \vdots \\ \overleftrightarrow{\nabla} \vec{f}_m \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Kompakter gestaltet sich der Divergenzoperator auf die Flussmatrix in Indexschreibweise,

$$\left(\overleftrightarrow{\nabla} \underline{\underline{f}} \right)_i = \sum_j \partial_{x_j} f_{ij}. \quad (2.11)$$

Für ein Gleichungssystem bestehend allein aus Gl. 2.8 ist die Flussmatrix gleich dem Zeilenvektor $(\rho \vec{u})^T$, während für zusätzliche Systemvariablen weitere Zeilen hinzukommen.

Für atmosphärische Anwendungen fehlen in der Formulierung Gl. 2.9 noch zwei grundsätzliche Aspekte. Es kommen Quellen bzw. Senken im Quellterm² $r_i(\vec{q})$ bezüglich dem jeweiligen q_i auf der rechten Seite hinzu, um z.B. Erdanziehungs- und Corioliskraft darstellen zu können. Weiterhin kommt generell eine Ortsabhängigkeit der Flüsse sowie der rechten Seiten \vec{r} in Betracht. Letzteres ist z.B. notwendig für die Einbindung von Orographie im Flachwassermodell. Die allgemeine, inhomogene Form der Gleichungssysteme lautet somit

$$\partial_t \vec{q}(\vec{x}, t) + \overleftrightarrow{\nabla} \underline{\underline{f}}(\vec{q}, \vec{x}) = \vec{r}(\vec{q}, \vec{x}). \quad (2.12)$$

In dieser Form sind die atmosphärischen Gleichungen aufzustellen, um sie mit dem in Kap. 3 beschriebenen Verfahren numerisch zu behandeln.

2.4. Euler-Gleichungen

Die Euler-Gleichungen, wie sie hier eingesetzt werden, umfassen das System der Gleichungen für die Dynamik einer trockenen und reibungsfreien Atmosphäre, betrachtet als ideales Gas mit der Zustandsgleichung

$$p = \rho RT, \quad (2.13)$$

die die Zustandsvariablen Druck p , Massendichte ρ und absolute Temperatur T zusammen mit der Gaskonstante R in Beziehung setzt.

Bei der Darstellung in Flussform tritt eine prinzipielle Unterscheidung von erhaltenen („conserved variables“) und primitiven Variablen („primitive variables“) auf. Für das erste physikalische Erhaltungsgesetz sind primitive und erhaltene Variable identisch: Die Massendichte ρ , deren Erhaltungsgleichung Gl. 2.8 bereits in Flussform vorliegt. Ohne Betrachtung von Massenaustausch mit der Umgebung bleibt es bei der homogenen Differentialgleichung.

2.4.1. Energiegleichung

Wegen der vielfältigen unterschiedlichen Darstellung der Energiegleichung und ihrer Herleitung in der Literatur ist hier eine konsistente Herleitung der zweiten Erhaltungsgleichung aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik angebracht. Ausgangspunkt ist eine

² Fortan wird der Begriff „Quellterm“ gemeinsam für Beiträge von Quellen und Senken verwendet, ohne diese zu unterscheiden. Eine Senke ist eine Quelle mit negativem Vorzeichen.

Darstellung wie in Etling (2008, Gl. 3.28), als Beziehung zwischen einer zugeführten spezifischen Wärme δQ und Temperatur- und Druckänderung bei festem spezifischem Volumen, ausgedrückt durch den Kehrwert der Dichte:

$$c_p dT = \frac{1}{\rho} dp + \delta Q . \quad (2.14)$$

Hier ist c_p die isobare spezifische Wärmekapazität, entsprechend des aus dieser Gleichung ersichtlichen direkten Eintrags der Wärme in die Temperatur bei konstantem Druck.

Ohne Energieaustausch ($\delta Q = 0$) folgt aus Gl. 2.14 direkt die Definition der potentiellen Temperatur θ , welche in diesem adiabatischen Fall eine Konstante ist. Unter Nutzung von Gl. 2.13 erhält man

$$\frac{dT}{T} = \frac{R}{c_p} \frac{dp}{p} \quad (2.15)$$

und via Integration von T_r bis T bzw. p_r bis p

$$\ln \frac{T}{T_r} = \frac{R}{c_p} \ln \frac{p}{p_r} \Leftrightarrow T_r = T \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} . \quad (2.16)$$

Die Größe auf der rechten Seite ist für adiabatische Zustandsänderung eine Konstante und wird als potentielle Temperatur

$$\theta = T \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \quad (2.17)$$

definiert. Der Wert von p_r ist frei wählbar aber üblicherweise in der Meteorologie auf $p_r = 1000 \text{ hPa}$ festgelegt.³

Auch wenn die vorliegende Arbeit lediglich von der adiabatischen Form der Energiegleichung mit $\delta Q = 0$ Gebrauch macht, wird folgend die Gleichung weiter mit Wärmeaustausch entwickelt, um eine vollständige Umsetzung von Gl. 2.14 zu erhalten. Mit der Definition Gl. 2.17 kann in der ursprüngliche Beziehung Gl. 2.14 nach etwas Umformung und Nutzung von Gl. 2.13,

$$dT - \frac{R}{c_p} \frac{T}{p} dp = \frac{1}{c_p} \delta Q , \quad (2.18)$$

das totale Differential von Gl. 2.17,

$$d\theta = \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} dT - \frac{R}{c_p} T \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \frac{1}{p} dp , \quad (2.19)$$

erkannt werden. Bezogen auf ein Zeitintervall dt folgt daraus

$$\frac{d\theta}{dt} = \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \frac{1}{c_p} \frac{\delta Q}{dt} , \quad (2.20)$$

wie es auch durch Norbury und Roulstone (2002, Gl. 3.18) in ähnlicher Form festgehalten wurde.

Für die Erhaltungsgleichung in Flussform wird diese Beziehung in Form der lokalen zeitlichen Ableitung einer erhaltenen Variable und einem zugehörigen Fluss benötigt.

³ In den Simulationen dieser Arbeit ist meist leicht abweichend $p_r = 1013 \text{ hPa}$ gleich dem Bezugswert zur Vorgabe des Bodendruckfeldes.

Dies erreicht der Bezug auf die kombinierte Variable $\rho\theta$ und zwei Darstellungen ihres totalen Zeitdifferentials, die beide Gebrauch von der Eulerschen Zerlegung machen,

$$\frac{d(\rho\theta)}{dt} = \rho \frac{d\theta}{dt} + \theta \frac{d\rho}{dt} = \rho \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \frac{1}{c_p} \frac{\delta Q}{dt} + \theta \partial_t \rho + \theta(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho \quad (2.21)$$

$$\frac{d(\rho\theta)}{dt} = \partial_t(\rho\theta) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho\theta, \quad (2.22)$$

und kombiniert mit der Massenerhaltung den Weg zur Erhaltungsgleichung für $\rho\theta$ weisen,

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \frac{1}{c_p} \frac{\delta Q}{dt} &= \partial_t(\rho\theta) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho\theta - \theta \partial_t \rho - \theta(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho \\ &= \partial_t(\rho\theta) + \underbrace{(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho\theta + \rho \theta \vec{\nabla} \vec{u}}_{\vec{\nabla}(\rho\theta\vec{u})} + \theta(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho - \theta(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho. \end{aligned}$$

Die Flussform der Energiegleichung lautet somit

$$\partial_t(\rho\theta) + \vec{\nabla}(\rho\theta\vec{u}) = \left(\frac{p_r}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \frac{1}{c_p} \frac{\delta Q}{dt}. \quad (2.23)$$

Es ist nochmals zu betonen, dass diese Form nur im Zusammenhang mit Gl. 2.8 ohne Quellterm gültig ist.

2.4.2. Bewegungsgleichungen

Die Bewegungsgleichungen bilden den dritten Baustein des gesamten Gleichungssystems, die Erhaltung des konservierten Impulses. Der Ansatz besteht in der Bilanz der Beschleunigungen aus Druckgradientenkraft und Corioliskraft aus der Rotation des Systems mit Rotationsvektor $\vec{\Omega}_p$ und als wichtigsten Beitrag der als konstant angenommenen Erdbeschleunigung g entgegen dem Vertikalvektor \vec{k} , wie in Etling (2008, Gl. 9.40) im Bild des β -Kanals (Gl. 2.1),

$$\partial_t \vec{u} = -(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - g\vec{k} - f_c \vec{k} \times \vec{u} - \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p, \quad (2.24)$$

mit Windvektor $\vec{u} = (u, v, w)^T$ im dreidimensionalen Fall.

In den Ansatz der Impulsdichte $\rho\vec{u}$ als Erhaltungsgröße kann diese Beschleunigungsbilanz eingesetzt werden,

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho\vec{u}) &= \vec{u} \partial_t \rho + \rho \partial_t \vec{u} \\ &= -(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})(\rho\vec{u}) + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - \rho g \vec{k} - f_c \vec{k} \times (\rho\vec{u}) - \vec{\nabla} p, \end{aligned} \quad (2.25)$$

wodurch sich darin mit der Matrixdivergenz des Produktes von dem Wind-Tensorprodukt

$$(\vec{u} \otimes \vec{u})_{ij} = u_i u_j \quad (2.26)$$

und der Dichte,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) &= \vec{e}_i \vec{\nabla}(\rho u_i \vec{u}) = \vec{e}_i \left(u_i \vec{\nabla}(\rho\vec{u}) + (\rho\vec{u} \cdot \vec{\nabla})u_i \right) \\ &= \vec{u} \vec{\nabla}(\rho\vec{u}) + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

sowie Eingruppierung des Druckgradienten die Flussform der Impulserhaltung ergibt,

$$\partial_t(\rho\vec{u}) + \overleftrightarrow{\nabla}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u} + p\overline{\text{Id}}) = -\rho g\vec{k} - f_c\vec{k} \times (\rho\vec{u}). \quad (2.28)$$

Auch hier ist zu beachten, dass die Massenerhaltung ohne Quellen und Senken aus Gl. 2.8 eine Vorbedingung für diese Form der Gleichung ist.

2.4.3. Flussform des gesamten Gleichungssystems

Mit Gl. 2.8, Gl. 2.23 und Gl. 2.28 und der Gasgleichung Gl. 2.13 ist das System für die erhaltenen Variablen

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \Theta \\ \vec{U} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho\theta \\ \rho\vec{u} \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

vollständig bestimmt und kann gemeinsam in Flussform formuliert werden. Dabei gilt für die vorliegende Arbeit eine Vereinfachung: Es wird kein Wärmeaustausch mit der Umgebung (Emission und Absorption von Strahlung) zugelassen, was Gl. 2.23 vereinfacht und \vec{r} auf die Terme für Coriolis- und Erdanziehungskraft reduziert.

In diesem Bild ergibt sich das grundlegende System der Euler-Gleichungen für die Modellierung der atmosphärischen Dynamik in dieser Arbeit:⁴

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \Theta \\ \vec{U} \end{pmatrix} + \overleftrightarrow{\nabla} \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \Theta \vec{U}^T \\ \frac{1}{\rho} \vec{U} \otimes \vec{U} + p\overline{\text{Id}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_c\vec{k} \times \vec{U} - \rho g\vec{k} \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Dieser Satz Gleichungen gilt für eine, zwei oder auch drei Dimensionen, wenn die Auswertungen der Kräfte mit \vec{k} gegebenenfalls im erweiterten Raum durchgeführt und die anwendbaren Komponenten der Produkte extrahiert werden.

2.4.4. Schallgeschwindigkeit

Die Geschwindigkeit der schnellsten Wellen im System ohne Advektion ist die Schallgeschwindigkeit

$$c_s = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \quad (2.31)$$

mit Isentropenkoeffizient

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}, \quad (2.32)$$

entsprechend der aus einer Linearisierung bestimmten Phasengeschwindigkeit in Etling (2008, Gl. 13.13) ohne Advektionskomponente.

2.4.5. Druck und Energie

Der Druck ist durch die erhaltene Variable Θ in Umkehr von Gl. 2.17 mit Gl. 2.13 durch

$$p = p_r \left(\frac{\Theta R}{p_r} \right)^\gamma \quad (2.33)$$

⁴ Vektoren/Matrizen sind lediglich Kurzschreibweise für ihre entsprechend in Zeilen bzw. Spalten eingefügten Elemente.

gegeben. Somit ist p in den Gleichungen nur eine Abkürzung für einen Ausdruck aus Θ und Konstanten. Ebenso ist Θ direkt mit der inneren Energiedichte E_{th} verknüpft, Massendichte sowie Impulsdichte mit der kinetischen Energie E_{kin} , sowie die Verteilung der Massendichte ρ mit der potentiellen Energiedichte E_{pot} ,

$$\begin{aligned} E_{\text{th}} &= \frac{1}{\gamma - 1} p = \frac{1}{\gamma - 1} p_r \left(\frac{\Theta R}{p_r} \right)^\gamma \\ E_{\text{kin}} &= \frac{\vec{U} \cdot \vec{U}}{2\rho} \\ E_{\text{pot}} &= \rho g z . \end{aligned} \quad (2.34)$$

Die Gesamtenergie des Systems ist das Integral der Summe dieser Dichten, der Gesamtenergiedichte

$$E_{\text{ges}} = \frac{1}{\gamma - 1} p + \frac{\vec{U} \cdot \vec{U}}{2\rho} + \rho g z . \quad (2.35)$$

2.4.6. Energie als Erhaltungsvariable

Als abgeleitete Größe ist die Gesamtenergie oder auch die thermische Energie keine formale Erhaltungsgröße der in Kap. 3 beschriebenen Diskretisierung in Anwendung auf Gl. 2.30. Formal erhalten sind nur die Integrale der Erhaltungsvariablen, in denen das System formuliert ist. Die Erhaltung von Masse ist theoretisch gewahrt, wie auch die des Impulses, wenn er nicht durch die Wirkung von Coriolis- und Erdanziehungskraft geändert wird. Praktisch sind natürlich nur Simulationen akzeptabel, welche die integrierte Energie in Näherung erhalten und vor allem keine langfristigen Trends produzieren. Das ist speziell bei der kinetischen Energie eine Frage der numerischen Stabilität. In Kap. 5 wird auf diese eingegangen.

Die Einbindung der Energie als Erhaltungsvariable ist der definierende Unterschied des von Giraldo und Restelli (2008) favorisierten Energiesystems, in dem die Gesamtenergiedichte E_{ges} als Variable anstatt Θ Verwendung findet:

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ E_{\text{ges}} \\ \vec{U} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \frac{E_{\text{ges}} + p}{\rho} \vec{U}^T \\ \frac{1}{\rho} \vec{U} \otimes \vec{U} + p \underline{\text{Id}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_c \vec{k} \times \vec{U} - \rho g \vec{k} \end{pmatrix} . \quad (2.36)$$

Die Energie ist dort auch formal erhalten. Dies wird erkauft durch aufwändigere Gleichungen, die verstärkt gekoppelt sind, allein schon durch den Druck, dessen Berechnung gemäß Gl. 2.35 alle Systemvariablen verknüpft.

Das im folgenden Kapitel beschriebene numerische Verfahren ist von der Wahl zwischen Energie- und θ -System unabhängig, jedoch bedarf es zusätzlichen Aufwandes, um die semi-implizite Zeitintegration (Abs. 3.2.2) mit einem schnellen vertikalen Präkonditionierer für ein weiteres Gleichungssystem umzusetzen.⁵ Daher konzentriert sich die vorliegende Arbeit auf das Gleichungssystem mit der in der Meteorologie üblichen Variablen θ bzw. der zugeordneten Erhaltungsvariablen Θ .

2.5. Euler-Gleichungen mit Referenzfeld

Als Vorstufe folgender Linearisierung oder zur Simulation von kleinen Störungen auf stationären Grundzuständen dient die Formulierung vom System Gl. 2.30 mit Bezug

⁵ Siehe dazu vertikale Linearisierung in Matrizenform in Abs. B.1.

auf ein zeitlich konstantes Referenzfeld. Dieses Feld entspricht einem der in Kap. 4 formulierten atmosphärischen Gleichgewichtszustände.

Im Gleichungssystem Gl. 2.30 ist ein stationärer Zustand in der Diskretisierung durch ein numerisches Gleichgewicht gegeben, welches immer einen gewissen von der Auflösung abhängigen Diskretisierungsfehler im Vergleich zum analytischen Gleichgewicht aufweist. Die Umformulierung der Gleichungen in Abweichungen von einem analytischen Gleichgewichtszustand verlagert den Diskretisierungsfehler allein auf die gewollten Störungen und nicht auf den stationären Grundzustand. Dies ist eine Grundvoraussetzung für die Untersuchungen in Abs. 7.2, deren Gegenstand die kurzfristige Entwicklung kleiner Störungen auf baroklin instabilen Gleichgewichtszuständen ist.

Damit ein Referenzfeld

$$\vec{q}_0 = \begin{pmatrix} \rho_0 \\ \Theta_0 \\ \vec{U}_0 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

im Wirken von Gl. 2.30 zeitlich konstant bleibt, müssen die Bedingungen

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\nabla} \vec{U}_0 &= 0 \\ \overleftrightarrow{\nabla} \frac{\Theta_0}{\rho_0} \vec{U}_0 &= 0 \\ \overleftrightarrow{\nabla} \frac{1}{\rho_0} \vec{U}_0 \otimes \vec{U}_0 + \overleftrightarrow{\nabla} p_0 &= -f_c \vec{k} \times \vec{U}_0 - \rho_0 g \vec{k} \end{aligned} \quad (2.38)$$

erfüllt sein. Diese Bedingungen werden in Kap. 4 zur Bestimmung von Gleichgewichtszuständen näher betrachtet.

Im Gleichungssystem Gl. 2.30 wird der Variablenvektor \vec{q} durch die Summe $\vec{q} + \vec{q}_0$ ersetzt. Im Kontext einer Formulierung mit Referenzfeld bezeichnet \vec{q} die Abweichung von diesem; auf ein weiteres Symbol wird in der Darstellung verzichtet. Durch die zeitliche Invarianz des Referenzfeldes verschwinden isolierte Terme mit diesem, so dass die Referenzform von Gl. 2.30 durch

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \Theta \\ \vec{U} \end{pmatrix} + \overleftrightarrow{\nabla} \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \frac{\Theta + \Theta_0}{\rho + \rho_0} (\vec{U} + \vec{U}_0)^T \\ \frac{(\vec{U} + \vec{U}_0) \otimes (\vec{U} + \vec{U}_0)}{\rho + \rho_0} + p \overline{\text{Id}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_c \vec{k} \times \vec{U} - \rho g \vec{k} \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

gegeben ist. Speziell die Quellterme auf der rechten Seite sind als lineare Operatoren unverändert für die Abweichungsvariablen. Wichtig ist die ebenfalls erfolgte Auftrennung des Druckes in $p + p_0$, mit

$$\begin{aligned} p &= p_r \left(\frac{(\Theta_0 + \Theta) R}{p_r} \right)^\gamma - p_0 \\ p_0 &= p_r \left(\frac{\Theta_0 R}{p_r} \right)^\gamma \end{aligned} \quad (2.40)$$

Es ist anzumerken, dass über das Referenzfeld eine Ortsabhängigkeit der Flussfunktion in das System getreten ist, während diese für den Coriolisterm auch in Gl. 2.30 präsent ist.

2.6. Linearisierte Euler-Gleichungen

Für das semi-implizite Zeitschrittverfahren und auch für eigenständige Untersuchungen wird eine linearisierte Version der Gleichungen benötigt, die zumindest formal als Matrix

gesehen werden kann und in einer speziellen auf die vertikale Wirkung reduzierten Form tatsächlich als solche zur Beschleunigung des Zeitschrittes eingesetzt wird. Eine Formulierung der Linearisierung des vertikalen Systems im Bild der DG-Diskretisierung ist im Angang zu finden (Abs. B.1).

Den Ansatz bilden kleine Abweichungen \vec{q} vom Basiszustand \vec{q}_0 . Es wird ein in diesen Abweichungen lineares Gleichungssystem benötigt, dass die Dynamik des vollen Systems nähert.

Die Massenerhaltung ist bereits linear. In der Θ -Gleichung kann der Advektionsterm durch Vernachlässigung der Abweichungen in Relation zum Referenzfeld sowie von Produkten der Abweichungen auf zwei rudimentäre Terme reduziert werden,

$$\frac{\Theta + \Theta_0}{\rho + \rho_0}(\vec{U} + \vec{U}_0) = \underbrace{\frac{\Theta}{\rho + \rho_0}}_{\rightarrow 0} \vec{U} + \underbrace{\frac{\Theta_0}{\rho + \rho_0}}_{\rightarrow \rho_0} \vec{U} + \frac{\overbrace{\Theta + \Theta_0}^{\rightarrow \Theta_0}}{\underbrace{\rho + \rho_0}_{\rightarrow \rho_0}} \vec{U}_0 \approx \frac{\Theta_0}{\rho_0} \vec{U} + \frac{\Theta_0}{\rho_0} \vec{U}_0, \quad (2.41)$$

wobei die Divergenz des zweiten Terms per Definition verschwindet und somit für die Linearisierung des Flusses

$$\overleftrightarrow{\nabla} \left(\frac{\Theta + \Theta_0}{\rho + \rho_0} (\vec{U} + \vec{U}_0) \right) \approx \overleftrightarrow{\nabla} \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \vec{U} \right) \quad (2.42)$$

gilt.

Der Impulsadvektionsterm erfährt eine ähnliche Behandlung,

$$\frac{(\vec{U} + \vec{U}_0) \otimes (\vec{U} + \vec{U}_0)}{\rho + \rho_0} \approx \frac{\vec{U}_0 \otimes \vec{U}_0}{\rho_0}, \quad (2.43)$$

wodurch er per Definition gemäß Gl. 2.38 zusammen mit dem Referenzdruckterm in der Balance mit den Kräften der rechten Seite verschwindet. Die somit verbleibende Form der Impulsgleichung lautet

$$\partial_t \vec{U} + \overleftrightarrow{\nabla} (p \underline{\text{Id}}) = -f_c \vec{k} \times \vec{U} - \rho g \vec{k}. \quad (2.44)$$

Der einzig nichtlineare Anteil ist der Druckterm

$$p(\Theta) = p_r \left(\frac{R}{p_r} \right)^\gamma (\Theta_0 + \Theta)^\gamma - p_0. \quad (2.45)$$

Mit $p(0) = 0$ per Definition ergibt eine Taylor-Entwicklung zur ersten Ordnung von Θ die Linearisierung des Druckes

$$p(\Theta) \approx p(0) + \underbrace{\frac{dp}{d\Theta}(0)}_{p_\theta} \Theta = p_r \left(\frac{\Theta_0 R}{p_r} \right)^\gamma \frac{\gamma}{\Theta_0} \Theta. \quad (2.46)$$

In der Gesamtheit steht somit das um den Referenzzustand \vec{q}_0 linearisierte Gleichungssystem,

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \Theta \\ \vec{U} \end{pmatrix} + \overleftrightarrow{\nabla} \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \frac{\Theta_0}{\rho_0} \vec{U}^T \\ p_\theta \Theta \underline{\text{Id}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_c \vec{k} \times \vec{U} - \rho g \vec{k} \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

2.7. Flachwassergleichungen

Die Flachwassergleichungen sind eine Vereinfachung der Euler-Gleichungen, welche die auf das Wechselspiel der Hydrostatik einer inkompressiblen vertikalen Wassersäule und des horizontalen Transportes reduziert ist. Demnach ist diese Vereinfachung nur in 1D und 2D für die horizontalen Koordinaten x und y sinnvoll.

Analog zu der Form in Lauter et al. (2008), ohne die Anpassung an Kugelgeometrie sowie mit der einfachen Hohle h als Variable anstatt des Geopotentials $\Phi = gh$, ist die Flussform der Flachwassergleichungen durch

$$\partial_t \begin{pmatrix} h \\ \vec{U} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \frac{\vec{U} \otimes \vec{U}}{h} + \frac{g}{2} h^2 \underline{\text{Id}} \end{pmatrix} = -f_c \vec{k} \times \vec{U} - gh \nabla h_B \quad (2.48)$$

gegeben. Hier steht $\vec{U} = h\vec{u}$ fur den Flachwasserimpuls und h_B ist eine Orographiehohle. Das Produkt mit dem Vertikalvektor in 1D bzw. 2D ist so zu verstehen, dass \vec{U} in den fehlenden Dimensionen mit Nullkomponenten erweitert wird und mit dem dreidimensionalen \vec{k} multipliziert, wie es schon bei den Euler-Gleichungen in 1D oder 2D erfolgt.

Mit einer fixen Volumen-Massendichte im Hintergrund ist die Interpretation von h und \vec{U} als Flachendichten der Luft bzw. des Impulses im zweidimensionalen Fall deutlich. Etwas anders strukturiert ist diese Form auch identisch zu der Darstellung von Williamson et al. (1992) vor Anwendung der spharischen Koordinaten, worauf sich auch der spatere Testfall von Galewsky et al. (2004) bezieht.

Nach Lauter et al. (2008) und auch der Betrachtung von Flachwasserwellen in Etling (2008, Abs. 13.3.1) ist die schnellste Wellengeschwindigkeit der Flachwassergleichungen

$$c_s = \sqrt{gh}. \quad (2.49)$$

2.8. Flachwasseraquivalente Dynamik mit Euler-Gleichungen

Ein Bindeglied zwischen den Flachwassergleichungen Gl. 2.48 und den vollen dreidimensionalen Euler-Gleichungen Gl. 2.30 ist eine Variante der ein- bzw. zweidimensionalen Euler-Gleichungen unter Festlegung von c_p und c_v dergestalt, dass $\gamma = 2$. Damit ergibt sich eine Form der Euler-Gleichungen, die strukturell den Flachwassergleichungen sehr nahe kommt. Speziell durch Betrachtung in zwei Dimensionen und direkter Verwendung von Gl. 2.33 ist so eine Zwischenstufe in der Horizontalen erschaffen, die unter Vernachlassigung der Variation von θ die Flachwasserdynamik mit Gl. 2.30 nachbildet,

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \Theta \\ \vec{U} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \frac{\Theta}{\rho} \vec{U}^T \\ \frac{1}{\rho} \vec{U} \otimes \vec{U} + \frac{R^2 \theta^2}{p_r} \rho^2 \underline{\text{Id}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_c \vec{k} \times \vec{U} \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Nur die nicht raumlich und zeitlich konstante potentielle Temperatur θ sowie der von 1/2 verschiedene Wert des Vorfaktors bedingen in dieser Form einen Unterschied zum Flachwassersystem. Das Quadrat der Dichte im Druckterm von Gl. 2.50 ist eine Analogie zum Quadrat der Wasserhohle in Gl. 2.48. Dabei unterscheiden Gl. 2.50 von Gl. 2.30 in 2D lediglich die gewahlten Werte fur die Warmekapazitaten des modellierten Gases. anderung auf den lufttypischen Wert von γ und Erweiterung von zwei horizontalen Dimensionen auf 3D vollendet den ubergang von den Flachwassergleichungen zu den Euler-Gleichungen in kleinen Schritten.

3. Unstetiges Galerkin-Verfahren

Die grundlegenden Entwicklung der unstetigen Galerkin-Diskretisierung (für englisch „Discontinuous Galerkin“, kurz DG) wurde von Cockburn (1998) detailliert beschrieben. Gegenstand dieses Kapitels ist eine Variante von DG mit niedrigen Polynomgraden und exakter Integration,¹ wie sie in der vorliegenden Arbeit Anwendung findet. Die Darstellung ist uniform für unterschiedliche Dimensionalitäten des Raumes, also praktisch in einer (1D), zwei (2D) oder drei Dimensionen (3D) angelegt. Für ausführlichen theoretischen Hintergrund sei auf Cockburn (1998) und die dort angeführte Literatur verwiesen. Das verwendete Verfahren geht aus dem in Cockburn (1998) mit „Runge Kutta Discontinuous Galerkin“ bezeichneten Verfahren hervor.

Die Beschreibung vermeidet generell einen engen Bezug zu einem bestimmten physikalischen Gleichungssystem. Es wird die grundlegende numerische Methode für die gesamte in Frage kommende Klasse von Differentialgleichungssystemen in Flussform etabliert. Dabei ist die inhomogene Form in Gl. 2.12 der Ausgangspunkt. In dieser sind Ortsabhängigkeit von Flussfunktion und Existenz eines Quellterms inbegriffen. Die Eignung des Verfahrens für diesen Fall folgt nicht aus der Beschreibung von Cockburn (1998) und wird in folgenden Kapiteln dieser Arbeit untersucht. Wesentlich ist eine in Kap. 5 motivierte Erweiterung, um mit niedrigem Polynomgrad der angesetzten Basisfunktionen und exakter Integration die atmosphärischen Gleichungen mit den Gleichgewichten der wirkenden Kräften auf der rechten Seite stabil behandeln zu können.

3.1. Räumliche Diskretisierung

Das Modellgebiet Ω wird in N Elemente E unterteilt (Abb. 3.1). Die Diskretisierung geht von dem einzelnen Element E aus, dessen Form von Gitterkonfiguration bzw. Orographie beeinflusst sein kann. Die globale Diskretisierung ist die Vereinigung der lokalen Darstellungen innerhalb der Elemente. Die räumliche Darstellung innerhalb eines Elementes ist durch den unstetigen Ansatz von der Umgebung entkoppelt.

3.1.1. Integralform und numerischer Fluss

Ausgehend von Gl. 2.12 beginnt die räumliche Diskretisierung mit der sogenannten „schwachen“ Form des Gleichungssystems in einem Element E . Für eine Systemvariable ϑ (Komponente des Vektors \vec{q}) besteht diese in der Integration des Produktes der betreffenden Zeile von Gl. 2.12 mit einer beliebigen glatten Testfunktion $\varphi(\vec{x})$ über das Element im n -dimensionalen Raum \mathbb{R}^n ,

$$\int_E (\partial_t \vartheta) \varphi \, d^n x + \int_E (\vec{\nabla} \cdot \vec{f}_\vartheta) \varphi \, d^n x = \int_E r_\vartheta \varphi \, d^n x . \quad (3.1)$$

Das Integral der Flussdivergenz kann durch partielle Integration,

$$\int_E (\vec{\nabla} \cdot \vec{f}_\vartheta) \varphi \, d^n x = \int_E \vec{\nabla} \cdot (\vec{f}_\vartheta \varphi) \, d^n x - \int_E \vec{f}_\vartheta \cdot \vec{\nabla} \varphi \, d^n x , \quad (3.2)$$

¹ Die Formulierung gilt für beliebige Polynomgrade, jedoch sind aus Effizienzgründen bei höheren Polynomgraden Modifikationen (Näherungen) angebracht (Giraldo, Hesthaven et al., 2002).

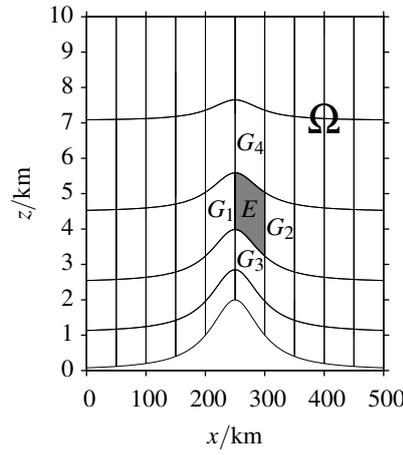


Abbildung 3.1.: Ein zweidimensionales Modellgebiet Ω und seine Aufteilung in Elemente, einem Bergüberstömungsexperiment entlehnt, in Koordinaten x und z mit Orographie (Berg am unteren Rand) und variabler Auflösung (feiner zum Boden), welche die Form des hervorgehobenen Elementes E und seiner Nachbarelemente G_1 bis G_4 beeinflussen

und Anwendung des Gaußschen Integralsatzes,

$$\int_E \overleftrightarrow{\nabla}(\vec{f}_\vartheta \varphi) \, d^n x = \int_{\partial E} \vec{f}_\vartheta \varphi \cdot \vec{\nu}_E \, d\sigma, \quad (3.3)$$

dergestalt umgeformt werden, dass der Divergenzoperator auf die Flussfunktion durch die Testfunktion φ ausgedrückt ist. Im über den gesamten Rand ∂E von E formulierten Integral ist $\vec{\nu}_E$ der nach außen zeigende Normalenvektor mit Einheitsbetrag auf der Grenzfläche von Element E zum jeweiligen Nachbarelement. Die schwache Form der Differentialgleichung für die Variable ϑ ist somit durch

$$\int_E (\partial_i \vartheta) \varphi \, d^n x + \int_{\partial E} \vec{f}_\vartheta \varphi \cdot \vec{\nu}_E \, d\sigma - \int_E \vec{f}_\vartheta \cdot \overleftarrow{\nabla} \varphi \, d^n x = \int_E r_\vartheta \varphi \, d^n x \quad (3.4)$$

gegeben.

Die Diskretisierung von Gl. 3.4 erfolgt durch Identifizierung von ϑ mit seiner diskreten Näherung, der Linearkombination der K Basisfunktionen

$$\varphi_i \in P^k(E) : \mathbb{R}^n \supseteq E \rightarrow \mathbb{R}, \vec{x} \mapsto \varphi_i(\vec{x}) \quad \forall i = 1, \dots, K \quad (3.5)$$

vom maximalen Polynomgrad k mit

$$\varphi_i(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \Omega \setminus E. \quad (3.6)$$

Mit elementweisen Koeffizientenvektor

$$\vec{\vartheta}(t) = (\vartheta_1(t), \dots, \vartheta_K(t))^T \quad (3.7)$$

und ebenso dem Vektor aller Basisfunktionen $\vec{\varphi}$ ist in E die Variable ϑ durch

$$\vartheta(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^K \vartheta_i(t) \varphi_i(\vec{x}) = \vec{\vartheta}(t) \cdot \vec{\varphi}(\vec{x}) \quad (3.8)$$

dargestellt. Die globale Darstellung in N Elementen mit jeweils K Basen erfolgt durch einen kombinierten Koeffizientenvektor mit $N \cdot K$ Komponenten für die Basisfunktionen,

die jeweils nur in einem Element von null verschiedenen Wert aufweisen. Dabei überschneiden sich die Darstellungen in angrenzenden Elementen. Die Diskretisierung ist stückweise stetig mit doppelten Werten, also einer Unstetigkeit, an den Elementgrenzen.

Ein Beispiel der stückweisen Stetigkeit bietet die Darstellung der Wasserhöhe h aus Simulationen eines Riemann-Problems (siehe Toro, 2009) mit den Flachwassergleichungen (Gl. 2.48) unter Nutzung verschiedener Basisgrade in Abb. 3.2. Das Gleichungssystem wurde in einer Dimension mit gleicher Anzahl Elemente aber unterschiedlichem k über eine gewisse Zeit integriert und anschließend die Wasserhöhe h an den Mittelpunkten der Elemente sowie in feinerer Auflösung unter Berücksichtigung der Elementgrenzen abgetastet. Je nach Basisgrad sind verschiedene lokale Strukturen und Unstetigkeiten zwischen Elementen präsent.

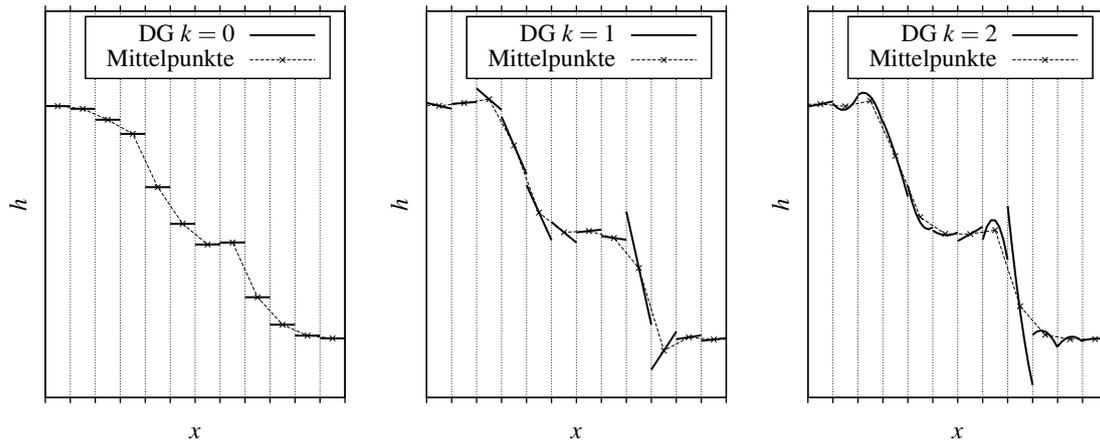


Abbildung 3.2.: Schematische Darstellung einer Variablen h in eindimensionalem DG mit drei verschiedenen Basisgraden, Elementgrenzen durch Koordinatengitter in x angedeutet

Für das Integral über den Elementrand in Gl. 3.4 muss mit der am Rand unstetigen Darstellung Gl. 3.8 — und damit auch unstetigem \vec{f}_ϑ — eine Entsprechung definiert werden. Dieses Integral ist berechenbar, wenn man die unstetige Flussfunktion durch einen numerischen Fluss \hat{f}_ϑ (im Gesamtbild \underline{f} durch \hat{f}) ersetzt, also das Integral selbst durch

$$\int_{\partial E} \hat{f}_\vartheta \varphi \cdot \vec{v}_E \, d\sigma . \quad (3.9)$$

Die Wahl des numerischen Flusses ist ein Charakteristikum für jedes DG-Verfahren und wird in der Literatur ausführlich diskutiert (siehe Cockburn (1998), auch allgemein zum Kontext des zugrunde liegenden Riemann-Problems Toro (2009)). Hier, wie auch bei Giraldo und Restelli (2008), findet der Rusanov- bzw. Lokal-Lax-Friedrichs-Fluss Anwendung,

$$\hat{f}_\vartheta = \{ \vec{f}_\vartheta \} + \frac{\lambda_s}{2} [[\vartheta]] \quad (3.10)$$

mit maximaler Signalgeschwindigkeit λ_s , Randmittelwert

$$\{ \vec{f}_\vartheta \} = \frac{1}{2} (\vec{f}_{\vartheta,E} + \vec{f}_{\vartheta,G}) \quad (3.11)$$

sowie dem Sprung

$$[[\vartheta]] = (\vartheta_E - \vartheta_G) \cdot \vec{v}_E \quad (3.12)$$

mit den Subskripten E und G für die Innenseite (betrachtetes Element E) bzw. die Außenseite (Nachbarelement G).

Dieser Fluss weist zwar laut Cockburn (1998) größere künstliche Viskosität (numerische Diffusion) auf als der Godunov-Fluss, ist aber einfacher zu berechnen und zeigt sehr ähnliche Ergebnisse. Für höhere Polynomgrade nimmt der Einfluss von Variationen des numerischen Flusses insgesamt ab (Cockburn, 1998). Auch das kann ein Grund sein, höhere Polynomgrade zu bevorzugen. Die vorliegende Arbeit hat aber zum Ziel, das Verhalten von DG mit Fokus auf niedrige Basisgrade zu charakterisieren, ohne die Anpassungen, die effiziente Arbeit mit hohen Graden erfordert.

Bedeutung des Randintegrals mit numerischem Fluss

Für die Umkehr der Blickrichtung, also dem Integral über den Rand ∂G , zeigt eine kurze Überlegung mit dem entsprechend invertierten Normalenvektor $\vec{v}_G = -\vec{v}_E$, dass der Sprung und auch der numerische Fluss identisch sind. Beim Integral Gl. 3.9 über eine Grenzfläche für das entsprechende Nachbarelement ist lediglich der Normalenvektor invertiert und so hat das Integral das umgekehrte Vorzeichen. Dadurch bleibt die Funktion dieses Integrals erhalten: Es stellt den Fluss zwischen zwei Elementen dar. Wenn etwas vom Element E durch die Grenzfläche abfließt, erreicht es das Element G als Zufluss. Treibend sind dabei einmal die Flussfunktion selbst, also das analytische Gleichungssystem, und ein künstlicher Bestandteil im numerischen Fluss, der aus der Unstetigkeit der konservierten Variablen erwächst und ihr entgegen wirkt.

Dies ist eine Stelle, an der dem Verfahren ein gewisses Maß an numerischer Diffusion inhärent ist, analog zum Abbau eines räumlichen Gradienten. Wenn die Darstellung der Variablen geringe Unstetigkeiten aufweist, ist die künstliche numerische Diffusion auch gering.

Im Vergleich der verschiedenen Basisgrade in Abb. 3.2 fällt die starke Diffusion von $k = 0$ (finite Volumen) auf. Auch bei ausschließlicher Betrachtung der verbundenen Elementmittelpunkte als Näherung des wahren Zustandes sind hier die physikalisch gegebenen Gradienten aus dem als Stufenfunktion gegebenen Startzustand deutlich reduziert. Erhöhung auf $k = 1$ bringt bereits eine deutliche Verbesserung in der Nachbildung der physikalisch geforderten Gradienten unter Reduktion der Unstetigkeiten.

Die bei niedrigeren Polynomgraden stärkere Diffusion kommt aus den im Mittel größeren Sprüngen der Variablen und damit erhöhtem Beitrag vom numerischen Fluss gemäß Gl. 3.10. Für $k = 0$ ist mangels eines Freiheitsgrades zur Darstellung elementinterner Gradienten die Dynamik vollständig durch den numerischen Fluss im Randintegral gegeben. In der vorliegenden Arbeit findet vorwiegend $k = 1$ als minimaler praktikabler Basisgrad Anwendung. Es ist die minimale Konfiguration, um sinnvoll die Eigenschaften der DG-Diskretisierung zu untersuchen.

Signalgeschwindigkeit

Der Faktor λ_s ist eine Kenngröße, die mit der maximalen Signalgeschwindigkeit durch die betrachtete Grenzfläche identifiziert wird. Wie auch bei der Wahl des Flusses selbst hat man hier grundsätzlich eine gewisse Freiheit in der Definition. Diese Größe hat bestimmenden Einfluss auf die numerische Diffusion, wodurch vor allem Anwendungen mit Basisgrad $k = 0$ von ihr dominiert sind.

Wie in der Formulierung von Giraldo und Restelli (2008, Gl. 33)² setzt sich die Signalgeschwindigkeit aus der Normalkomponente der Advektion \vec{u} und der eigentlichen Wellengeschwindigkeit c_s zusammen. Für atmosphärische Bedingungen fern von

² Nach Korrektur eines offensichtlichen Fehlers sollte dort stehen: $\lambda = \max(|U^L| + a^L, |U^R| + a^R)$.

Extremen wäre auch ein allgemeiner Mittelwert für die Schallgeschwindigkeit unter Vernachlässigung der Advektion ausreichend, allerdings hat der hier verfolgte Ansatz,

$$\lambda_s = \max (|\vec{u}_1 \cdot \vec{v}_E| + c_{s,1}, |\vec{u}_2 \cdot \vec{v}_E| + c_{s,2}) , \quad (3.13)$$

den Vorteil, dass er ohne Unterscheidung auch für simple Gleichungssysteme wie die lineare Advektion in gegebenem Windfeld,

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \rho \vec{u} = 0 , \quad (3.14)$$

funktioniert. Dort ist $c_s = 0$ und die Advektionskomponente bestimmend.

Für linearisierte Gleichungssysteme (Gl. 2.47) ist eine angepasste Definition von λ_s nötig, die auch den numerischen Fluss linear in \vec{q} gestaltet. Dazu genügt die Berechnung von Advektions- und Wellenanteil aus dem Referenzfeld, wodurch λ_s einen von \vec{q} unabhängigen Wert bekommt. Das Referenzfeld kann dabei auch eine Advektionskomponente beisteuern.

Diskretisierte schwache Form

Mit den vorangegangenen Definitionen inklusive der Einbindung des numerischen Flusses erfolgt der Übergang von der kontinuierlichen schwachen Form Gl. 3.4 zur diskretisierten Form

$$\int_E (\partial_t \vartheta) \varphi \, d^n x + \int_{\partial E} \hat{f}_\vartheta \varphi \cdot \vec{v}_E \, d\sigma - \int_E \vec{f}_\vartheta \cdot \vec{\nabla} \varphi \, d^n x = \int_E r_\vartheta \varphi \, d^n x . \quad (3.15)$$

in der ϑ nun für die diskretisierte und an Elementgrenzen unstetige Näherung der analytischen Variablen steht. Für die Testfunktion φ ist weiterhin eine beliebige im Element glatte Funktion einsetzbar.

3.1.2. Koeffizientendarstellung der Gleichungen

Die Basisdarstellung Gl. 3.8 trennt die räumliche Variabilität der Variable ϑ von der zeitlichen. Letztere ist allein durch die Koeffizienten $\bar{\vartheta}$ bestimmt,

$$\partial_t \vartheta(\vec{x}, t) = (\partial_t \bar{\vartheta}(t)) \cdot \vec{\varphi}(\vec{x}) . \quad (3.16)$$

Durch Gl. 3.15 ist die zeitliche Entwicklung dieser Koeffizienten bestimmbar. Die Zeitableitungen können aus dem Volumenintegral herausgelöst werden, wodurch sich unter Einsatz einer konkreten Basisfunktion φ_i als Testfunktion die Zwischenform

$$\partial_t \bar{\vartheta} \cdot \int_E \vec{\varphi} \varphi_i \, d^n x = \int_E \vec{f}_\vartheta \cdot \vec{\nabla} \varphi_i \, d^n x + \int_E r_\vartheta \varphi_i \, d^n x - \int_{\partial E} \hat{f}_\vartheta \varphi_i \cdot \vec{v}_E \, d\sigma . \quad (3.17)$$

ergibt. Die linke Seite lässt sich mit der Definition der symmetrischen lokalen Massematrix \vec{M} über

$$M_{ij} = \int_E \varphi_i \varphi_j \, d^n x \Rightarrow \vec{M}_i = \begin{pmatrix} M_{i1} \\ \vdots \\ M_{iK} \end{pmatrix} = \int_E \vec{\varphi} \varphi_i \, d^n x \quad (3.18)$$

zu

$$\partial_t \bar{\vartheta} \cdot \int_E \vec{\varphi} \varphi_i \, d^n x = \int_E \vec{\varphi} \varphi_i \, d^n x \cdot \partial_t \bar{\vartheta} = \vec{M}_i \cdot \partial_t \bar{\vartheta} \quad (3.19)$$

vereinfachen.

Weiterhin liefert eine Zusammenfassung der Gleichungen für alle³ φ_i , also dem Vektor der Basisfunktionen $\vec{\varphi}$ über

$$\overline{M} \partial_t \vec{\vartheta} = \int_E (\nabla \vec{\varphi}) \vec{f}_\vartheta \, d^n x + \int_E r_\vartheta \vec{\varphi} \, d^n x - \int_{\partial E} \vec{\varphi} (\hat{f}_\vartheta \cdot \vec{\nu}_E) \, d\sigma. \quad (3.20)$$

eine Bestimmungsgleichung für $\partial_t \vec{\vartheta}$. Hier ist der Gradient des Basisfunktionenvektors als Matrix definiert, von der $\nabla \varphi_i$ den i -ten Zeilenvektor darstellt, so dass

$$(\nabla \vec{\varphi}) \vec{f}_\vartheta = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \varphi_K}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial \varphi_K}{\partial x_n} \end{pmatrix} \vec{f}_\vartheta = \begin{pmatrix} (\nabla \varphi_1) \vec{f}_\vartheta \\ \vdots \\ (\nabla \varphi_K) \vec{f}_\vartheta \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Durch Anwendung der invertierten Massematrix werden die Zeitableitungen der Koeffizienten isoliert und es entsteht ein Ausdruck für die Berechnung dieser,

$$\partial_t \vec{\vartheta} = \int_E \left[\overline{M}^{-1} \nabla \vec{\varphi} \right] \vec{f}_\vartheta \, d^n x + \int_E r_\vartheta \left[\overline{M}^{-1} \vec{\varphi} \right] \, d^n x - \int_{\partial E} \left[\overline{M}^{-1} \vec{\varphi} \right] (\hat{f}_\vartheta \cdot \vec{\nu}_E) \, d\sigma. \quad (3.22)$$

Hier sind die in eckigen Klammern eingefassten Terme allein durch die Basisfunktionen bestimmt und können somit einmalig zu Beginn einer Berechnung abgespeichert und als Operatoren in den Zeitschritten wieder verwendet werden. Wie schon bei Läter et al. (2008) sind hier zur wesentlichen Laufzeit einer Simulation keine Invertierungen von Massematrizen erforderlich.

3.1.3. Koordinatentransformation mit Orographie

Die Berechnung der Tendenzen erfolgt durch numerische Auswertung der Integrale in Gl. 3.22 für alle Komponenten des Variablenvektors \vec{q} . In diese Integrale ist die Geometrie des Gitters, die genaue Verortung eines Elementes E im Modellgebiet Ω , einzubeziehen. Wie in Abb. 3.1 zu ersehen, können auch in einem topologischen Rechteckgitter die Elemente unterschiedliche Formen und Ausmaße im \mathbb{R}^n aufweisen. Während die Formulierung der Gleichungssysteme in den globalen Koordinaten $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ nahe liegt, sind die Integrale aus Gl. 3.22 einfacher in einem auf das Element E bezogenen lokalen Koordinatensystem zu berechnen.

Die Betrachtung der Koordinatentransformation ist angelehnt an die Darstellung von Läter et al. (2008), jedoch wird diese hier nur zur Übertragung der Integration und der Basisfunktionen bzw. ihrer Gradienten in die globalen Koordinaten genutzt. Die Formulierung der Gleichungen bleibt unbeeinflusst. Hall und Nair (2013) beschreiben für ein sphärisches Modell unter Einsatz eines „Yin-Yang“-Gitters (Kombination von gedrehten geographischen Koordinatensystemen zur Umgehung des Polproblems) ebenfalls eine solche Koordinatentransformation. Diese Transformation $\vec{\gamma}_E$ vermittelt zwischen globalen Koordinaten in dem beliebig geformten Element E und seinen lokalen Koordinaten im zugeordneten Referenzelement D , wie es Abb. 3.3 andeutet.

³ Gemeint sind alle K Basen mit Beitrag in E . Die zusammengefasste Gleichung für Integrale in E ist aber identisch für die globale Massematrix und entsprechend alle $N \cdot K$, da die zusätzlichen Beiträge in allen Integralen inklusive der Massematrix verschwinden.

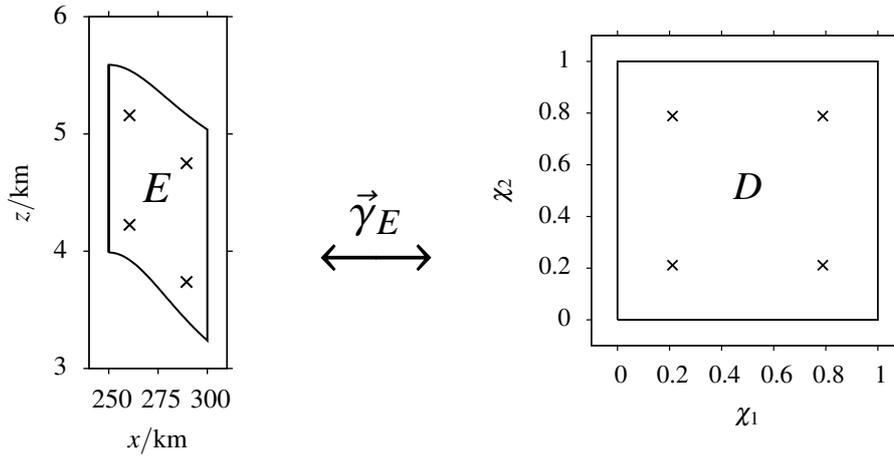


Abbildung 3.3.: Schema der Koordinatentransformation $\vec{\gamma}_E$ zwischen Realelement E und Referenzelement D mit eingezeichneten Quadraturpunkten (Abs. 3.1.4) für $k = 1$ in zwei Dimensionen (siehe Abb. 3.1 für Einbettung von E in das Gesamtgebiet)

Den Ansatz bildet ein einfach strukturiertes Referenzelement D . Bei Lauter et al. (2008) sind es rechtwinklige Dreiecke mit Kathetenlange 1, hier Einheitsrechtecke (Quadrate bzw. Quader, siehe Abb. 3.3). Einschlielich moglicher Deformationen wird die Koordinatentransformation $\vec{\gamma}_E$ definiert,

$$\vec{\gamma}_E : \mathbb{R}^m \supseteq D \rightarrow E \subseteq \mathbb{R}^n, \vec{\chi} \mapsto \vec{\gamma}_E(\vec{\chi}). \quad (3.23)$$

Eine globale Funktion $s(\vec{x})$ wird ber

$$\varphi \circ \vec{\gamma}_E = s(\vec{\gamma}_E(\vec{\chi})) \quad (3.24)$$

auf lokalen Koordinaten ausgewertet, entsprechend eine in lokalen Koordinaten definierte Funktion $\varphi(\vec{\chi})$ durch die Umkehrtransformation via

$$\varphi \circ \vec{\gamma}_E^{-1} = \varphi(\vec{\gamma}_E^{-1}(\vec{x})) \quad (3.25)$$

auf globalen Koordinaten. Die Basisfunktionen φ sind in bisheriger Betrachtung als globale Funktionen der Koordinaten \vec{x} erschienen. Tatsachlich sind sie im Referenzelement D definiert und werden durch $\vec{\gamma}_E$ bertragen. Streng genommen sind sie damit nur Polynome auf D , nicht auf E .

Die Abbildung $\vec{\gamma}_E$ bildet eine lokale Basis aus den Vektoren \vec{b}_i sowie die Dualbasis \vec{b}^j dazu,

$$\vec{b}_i(\vec{\chi}) = \frac{\partial}{\partial \chi_i} \vec{\gamma}_E(\vec{\chi}); \quad \vec{b}_i \cdot \vec{b}^j = \delta_{ij}. \quad (3.26)$$

Die Dualbasis als $n \times m$ -Matrix \overline{B} mit den \vec{b}^j als Spaltenvektoren dient der Transformation des Gradienten der in D definierten Basisfunktionen,

$$\overline{\nabla} \varphi(\vec{\chi}) = \overline{\nabla} (\varphi \circ \vec{\gamma}_E^{-1}) = \overline{B} \sum_{i=1}^m \frac{\partial \varphi}{\partial \chi_i}(\vec{\chi}) \vec{e}_i, \quad (3.27)$$

und auch der Bestimmung normierter Normalenvektoren \vec{v}_E auf Grenzflachen aus der lokalen Entsprechung \vec{v}_D ,

$$\vec{v}_E = \frac{\overline{B} \vec{v}_D}{|\overline{B} \vec{v}_D|}. \quad (3.28)$$

Wesentlicher Einsatz der Koordinatentransformation ist Übertragung der zu berechnenden Integrale von D nach E . Während die Integranden in den globalen Koordinaten von E ausgewertet werden, soll die Integration selbst in der einfachen Geometrie von D stattfinden. Dazu bedarf es der Gramschen Determinante

$$\text{Gram}(\underline{B}) = \left| (\vec{b}_i \cdot \vec{b}_j)_{ij} \right|. \quad (3.29)$$

Die Wurzel dieser gibt anschaulich das von der Dualbasis gebildete Spatvolumen wieder und erlaubt die Überführung des Volumenintegrals einer einbeliebige Funktion $s(\vec{x})$ über E in lokale Koordinaten in D ,

$$\int_E s \, d^n x = \int_D s \circ \vec{\gamma}_E \sqrt{\text{Gram}(\underline{B})} \, d^m \chi. \quad (3.30)$$

Flächenintegrale benötigen noch eine Betrachtung der lokalen Krümmung der Fläche (siehe Ober- und Unterrand von E in Abb. 3.3 im Gegensatz zu den Rändern in x), welche durch den Betrag des transformierten Normalenvektors \vec{v}_D (vgl. Gl. 3.28) hinzukommt,

$$\int_{\partial E} s \, d\sigma = \int_{\partial D} s \left| \underline{B} \vec{v}_D \right| \sqrt{\text{Gram}(\underline{B})} \, d\sigma_D. \quad (3.31)$$

Die konkrete Anwendung für das Kanalmodell mit $n = m$ definiert rechteckige Einheitselemente, welche durch eine dreistufige Transformation

$$\vec{\gamma}_E = \vec{\gamma}_{\text{oro}} \circ \vec{\gamma}_{\text{res}} \circ \vec{\gamma}_{\text{grid}} \quad (3.32)$$

auf den Realraum abgebildet werden.

- Die erste Stufe, die Gittertransformation $\vec{\gamma}_{\text{grid}}$ behandelt die Zerteilung des normierten Gesamtgebietes in Elemente von einheitlicher Größe.
- Die zweite Stufe, die Auflösungstransformation $\vec{\gamma}_{\text{res}}$, verzerrt den Raum zur Verwirklichung der optionalen adaptiven Auflösung. Diese wird somit ohne Veränderung der Topologie, d.h. der logischen Gitterstruktur inklusive der Gesamtzahl der Elemente und ihrer Anordnung, erreicht.
- Die dritte Stufe, die Orographietransformation $\vec{\gamma}_{\text{oro}}$, wendet Orographie als gleichförmige Stauchung des Raumes in die betrachtete Koordinatenrichtung an (siehe Einengung des Gitters in z durch den Bodenverlauf in Abb. 3.1) und skaliert mit den konfigurierten physikalischen Ausdehnungen der Modelldimensionen.

Zur Vereinfachung bezieht sich die folgende Darstellung dieser Teiltransformationen soweit möglich auf eine einzelne beispielhaften Dimension mit der jeweils ausgewählten i -ten Komponente der Koordinatenvektoren.

Zerlegung in Elemente

Bei der Teilung in N_i Elemente ist die ungestörte Koordinate eines Punktes im n_i -ten Element im globalen Einheitsintervall durch

$$x_{\text{grid},i} = \vec{\gamma}_{\text{grid}}(\chi_i) = \frac{n_i - 1 + \chi_i}{N_i} \quad \forall (N_i, n_i \in \mathbb{N}_+ : n_i \leq N_i \wedge \chi_i \in [0; 1]) \quad (3.33)$$

gegeben. Das Resultat $x_{\text{grid},i}$ ist eine Koordinate im auf das Gesamtgebiet bezogenen Einheitsintervall.

Adaptive Auflösung

Im einfachsten Fall homogener Auflösung ist die Auflösungsabbildung die Identität. Variable Auflösung wird durch eine lokale Dehnung/Stauchung des Raumes und damit verbundener Änderung des dem Element zugeordneten Teilvolumens erreicht. Die Verortung der Raumverzerrung wird von einem Profil $\zeta_{\text{grid},i}(x_{\text{grid},i})$ bewirkt, über

$$x_{\text{res},i} = \vec{\gamma}_{\text{res}}(x_{\text{grid},i}) = x_{\text{grid},i} + w_{\text{res},i} \frac{\zeta_{\text{res},i}(x_{\text{grid},i})}{\max_{0 \leq x \leq 1} \left| \frac{d}{dx} \zeta_{\text{res},i}(x) \right|}. \quad (3.34)$$

Der Betrag von $w_{\text{res},i} \in [-1; 1]$ bestimmt die Stärke der Abweichung von homogener Auflösung und das Vorzeichen die Ausrichtung zu Ober- oder Unterrand in der betreffenden Dimension. Das Profil $\zeta_{\text{res},i}$ ist dabei nicht völlig frei. Es kann bestimmte Spezialfälle der in Abs. A.1 beschriebenen Profile verkörpern, die im Zusammenhang mit Gl. 3.34 eine streng monotone bijektive sowie differenzierbare Abbildung von $[0; 1]$ auf $[0; 1]$ ergeben. Die Normierung mit dem Maximum der Profildableitung im Intervall als Vorbedingung sorgt hier dafür, dass die Abbildung mit $w_{\text{res}} \in [-1; 1] \in \mathbb{R}$ monoton bleibt.

Orographie

Die Orographieabbildung überträgt die Koordinaten aus dem globalen Einheitsintervall in die konfigurierte Ausdehnung L_i , wobei die Orographie selbst allgemein als ortsabhängige Verzerrung des gesamten Gebietes in eine bestimmte Richtung definiert ist. In der atmosphärischen Anwendung ist dies üblicherweise die Stauchung in z vom Boden aus (in Abhängigkeit von Orographiehöhe reduzierte Modellhöhe in Abb. 3.1). Allerdings lässt der Mechanismus auch u.a. Deformation der seitlichen Ränder des Kanals zu, was z.B. die Simulation von Strömungen durch laterale Einengungen ermöglicht.

Die Form der Orographie ist wiederum durch passende Funktionen $x_{\text{top},i}(\vec{x}_{\text{res}} \setminus x_{\text{res},i})$ für den oberen und $x_{\text{bot},i}(\vec{x}_{\text{res}} \setminus x_{\text{res},i})$ für den unteren Rand definiert,

$$x_{\text{oro},i} = \vec{\gamma}_{\text{oro}}(x_{\text{res},i}) = L_i \left((1 + x_{\text{top},i} - x_{\text{bot},i}) x_{\text{res},i} + x_{\text{bot},i} \right). \quad (3.35)$$

Die Profile hängen dabei vom gesamten Vektor \vec{x}_{res} exklusive der Komponente in der aktuell betrachteten Dimension ab, z.B. über ein Produkt individueller Profile je Koordinatenrichtung,

$$\begin{aligned} x_{\text{top},i}(\vec{x}_{\text{res}} \setminus x_{\text{res},i}) &= h_{\text{top},i} \prod_{j \neq i} \zeta_{\text{top},ij}(x_{\text{res},j}) \\ x_{\text{bot},i}(\vec{x}_{\text{res}} \setminus x_{\text{res},i}) &= h_{\text{bot},i} \prod_{j \neq i} \zeta_{\text{bot},ij}(x_{\text{res},j}). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Rücktransformation

Für die Auswertung von Modelldaten, insbesondere der Abtastung von Modellzuständen für die Darstellung oder Analyse mit Programmen, die mit auf Gitterpunkten ausgewerteten Daten arbeiten, oder auch Vergleiche zwischen verschiedenen DG-Konfigurationen, ist die Umkehr der Koordinatentransformation $\vec{\gamma}_E$ vonnöten, um zu einem gegebenen globalen \vec{x} das passende $\vec{\chi}$ im zugehörigen Element E bzw. D zu erhalten.

Für bestimmte Spezialfälle ist die Umkehr analytisch zu bewältigen, aber es ist praktikabel, dies numerisch durch z.B. ein Newton-Verfahren (Bronstein et al., 2001, Abs. 12.8.3) umzusetzen. Unter Annahme einer unbekanntes Gitterstruktur kann ein Suchalgorithmus die passende Gitterzelle daran identifizieren, dass das für diese erhaltene $\vec{\chi}(\vec{x})$

tatsächlich innerhalb des Referenzelementes D liegt. Dieser Ansatz ist leistungsfähig genug für die in dieser Arbeit dargestellten Ergebnisse.

3.1.4. Quadratur

Die Integration selbst wird durch Legendre-Gauß-Quadratur durchgeführt, d.h. die Näherung von Integralen durch Quadraturformeln vom Gauß-Typ über die Werte an Stützstellen, die Nullstellen von Legendre-Polynomen entsprechen. Im eindimensionalen Intervall $[0; 1] \in \mathbb{R}$ des Referenzelementes D wird ein Integral einer allgemeinen Funktion $s(x)$ durch

$$\int_0^1 s(\chi) d\chi \approx \sum_{i=1}^{n_{\text{quad}}} w_i s(\chi_i) \quad (3.37)$$

mit n_{quad} Stützpunkten χ_i und entsprechenden Gewichten w_i dargestellt.

Für Polynome vom Grad $(2n_{\text{quad}} - 1)$ sind diese Näherungen analytisch exakt, siehe auch leicht variierte Darstellung in Bronstein et al. (2001, Abs. 19.3.3). In dieser Arbeit relevante Stützstellen und Gewichte bis $n_{\text{quad}} = 3$ für Polynomgrade bis fünf im Intervall $[0; 1]$ sind in Tab. 3.1 aufgelistet. Für Polynomgrad $k = 2$ (Produkt zweier Basen mit $k = 1$) sind zweidimensionale Quadraturpunkte zudem in Abb. 3.3 verzeichnet.

Die in verschiedenen kartesischen Dimensionen unabhängig definierten Quadraturregeln mit ihren Stützstellen und Gewichten bilden im Tensorprodukt die mehrdimensionale Quadraturregel im Referenzelement D bzw. auf dessen Rand ∂D . Nach Gl. 3.30 bzw. Gl. 3.31 erfolgt der Übergang zum Integral über E bzw. ∂E durch Einbeziehung der Gramschen Determinante in die Quadraturgewichte und Assoziation globaler Koordinaten durch die Koordinatentransformation selbst.

Im Anwendungsfall auf nichtlineare Differentialgleichungen, also nichtlineare Flüsse und Quellterme, sowie auch bei Gitterverzerrungen durch Orographie oder variable Auflösung tritt unweigerlich ein Integrationsfehler auf. Dieser bewirkt allerdings lediglich einen numerischen Fehler, der wie jede Diskretisierung die zeitlichen Änderungen der Erhaltungsvariablen stört. Auf die Erhaltungseigenschaften hat dieser keinen Einfluss. Es ist die numerische Näherung an das analytische Integral erhalten, auch wenn sie einen Fehler im Vergleich zu letzterem aufweist.⁴ Für die Genauigkeit des Verfahrens ist es jedoch von Vorteil, die Quadratur grundsätzlich dem gewählten Basisgrad bzw. den zu erwartenden minimalen Polynomgraden der Integranden anzupassen.

Unter der Annahme von \vec{r} und \vec{f} als lineare Funktionen von \vec{q} sowie unter Vernachlässigung von Gitterverzerrungen kann man den Termen in Gl. 3.22 wie folgt Polynomgrade

| n | i | χ_i | w_i |
|-----|-----|--------------------------|--------------------------|
| 1 | 1 | 0.5 | 1 |
| 2 | 1 | 0.211 324 865 405 186 25 | 0.499 999 999 999 992 78 |
| | 2 | 0.788 675 134 594 813 75 | 0.499 999 999 999 992 78 |
| 3 | 1 | 0.112 701 665 379 258 13 | 0.277 777 777 777 775 29 |
| | 2 | 0.5 | 0.444 444 444 444 444 42 |
| | 3 | 0.887 298 334 620 741 92 | 0.277 777 777 777 775 29 |

Tabelle 3.1.: Knoten und Gewichte für die Gauß-Quadratur im Intervall $[0; 1]$ aus numerischer Bestimmung (ohne Korrektur von offensichtlichem Rundungsfehler)

⁴ Siehe Abs. A.5.

zuordnen:⁵

$$\int_E \underbrace{\left[\overline{\mathbf{M}}^{-1} \overline{\nabla} \vec{\varphi} \right]}_{\in P^{k-1}} \underbrace{\vec{f}_\vartheta}_{\in P^k} d^n x + \int_E \underbrace{r_\vartheta}_{\in P^k} \underbrace{\left[\overline{\mathbf{M}}^{-1} \vec{\varphi} \right]}_{\in P^k} d^n x - \int_{\partial E} \underbrace{\left[\overline{\mathbf{M}}^{-1} \vec{\varphi} \right]}_{\in P^k} \underbrace{(\hat{f}_\vartheta \cdot \vec{\nu}_E)}_{\in P^k} d\sigma. \quad (3.38)$$

Es kommen somit unter den günstigsten Bedingungen Polynome mit maximalem Grad $2k$ in einer Raumdimension zur Integration und auf diese ist die Quadratur zur exakten Integration eingestellt.⁶ Ebenfalls ist diese Quadratur passend zur Berechnung der Massematrizen, die aus Produkten von zwei Basisfunktionen bestehen.

3.1.5. Basisfunktionen im Rechteckgitter

Als Basisfunktionen φ_i finden Lagrangepolynome auf Legendre-Gauß-Lobatto-Knoten (siehe ebenfalls Bronstein et al. (2001, Abs. 19.3.3)) Anwendung, eine einzelne Basisfunktion $\varphi_{d,i}$ auf dem Referenzelement D in der Dimension $d = 1 \dots n$ definiert durch

$$\left. \begin{array}{l} k > 0 \\ i, j = 1 \dots (k+1) \end{array} \right\} : \varphi_{d,i}(\chi) = \prod_{j \neq i} \frac{\chi - \chi_j}{\chi_i - \chi_j} \quad (3.39)$$

$$k = 0 : \varphi_{d,1} = 1$$

Für Polynomgrad k gibt es jeweils $k+1$ Stützpunkte χ_i und zugehörige Basisfunktionen. Die Stützpunkte bis $k=2$ sind in Tab. 3.2 aufgeführt. Dabei ist $k=0$ ein Spezialfall mit der konstanten Funktion und nominellem Stützpunkt in der Mitte des eindimensionalen Intervalls. Die Basen für Basisgrad eins und zwei sind in Abb. 3.4 dargestellt.

Aus diesen eindimensionalen Basen sind die n -dimensionalen Basen im Tensorprodukt für den kartesischen Raum definiert. Mit dem n -dimensionalen Index \vec{i} ist eine Gesamtbasis durch das Produkt

$$\vec{i} = (i_1 \dots i_n) : \varphi_{\vec{i}}(\vec{\chi}) = \prod_{d=1}^n \varphi_{d,i_d}(\chi_d) \quad (3.40)$$

definiert. Damit ist auch die Wahl der Basisgrade und damit Anzahl der Basen je Koordinatenrichtung d unabhängig von den anderen Dimensionen. Eine auch in Gl. 3.40 weiterhin präsenste Eigenschaft von Gl. 3.39 ist, dass jede Basisfunktion an den Stützungen der anderen gleich null ist. Die Definition Gl. 3.40 bestimmt zusammen mit der Abbildung Gl. 3.32 die globale Basisfunktion Gl. 3.5 innerhalb eines Elementes.

| k | χ_1 | χ_2 | χ_3 |
|-----|----------|----------|----------|
| 0 | 1/2 | | |
| 1 | 0 | 1 | |
| 2 | 0 | 1/2 | 1 |

Tabelle 3.2.: Stützpunkte zu den wichtigen eindimensionalen Basen bis $k=2$

⁵ Bei $k=0$ entfällt das Volumenintegral des Flusses komplett.

⁶ Tatsächlich ist die für $2k$ konstruierte Quadratur auch für $2k+1$ exakt.

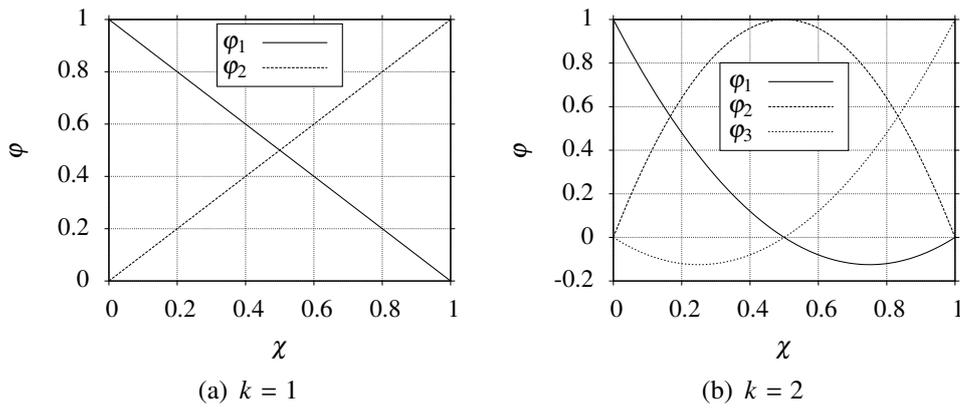


Abbildung 3.4.: Eindimensionale Basisfunktionen für Basisgrad 1 und 2

3.1.6. Diskretisierung von analytischen Anfangsbedingungen

Anfangsbedingungen für die in dieser Arbeit relevanten synthetischen Simulationen werden von analytischen Ausdrücken in die diskrete Darstellung durch die gewählten Basispolynome übertragen, indem die Definition der Lagrangepolynome über Stützstellen genutzt wird. An diesen Stützstellen $\vec{x}_i = \vec{\gamma}_E(\vec{\chi}_i)$ wird die analytische Größe $\vartheta_{\text{anal}}(\vec{x})$ ausgewertet und bestimmt so die Koeffizienten ϑ_i der polynomialen Darstellung,

$$\vartheta(\vec{x}) = \sum_{i=1}^K \vartheta_i \varphi_i(\vec{x}) \quad (3.41)$$

$$\vartheta_i = \vartheta_{\text{anal}}(\vec{x}_i) .$$

Dies ist eine sehr einfache Variante der Abbildung in den diskreten Raum. Eine andere wäre die Projektion mit einer Integralnorm, um den integralen Diskretisierungsfehler zu minimieren. Ein Vorteil der hier gewählten Variante ist — bei Basis-Stützstellen an Elementrändern — die Beibehaltung von Stetigkeit eines analytischen Zustandes an diesen.

3.2. Zeitliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung, beispielhaft für eine Systemvariable in Gl. 3.22, erlaubt eine Auswertung der Zeitableitung der Systemvariablen in Darstellung durch Basiskoeffizienten,

$$\vec{F}(\vec{q}) := \partial_t \vec{q} . \quad (3.42)$$

Die räumliche Struktur des ursprünglichen Differentialgleichungssystems Gl. 2.12 ist in der diskretisierten Darstellung von \vec{q} — den Koeffizienten zu allen Systemvariablen im Vektor \vec{q} — und der Bestimmung von \vec{F} enthalten und so ist \vec{F} als die rechte Seite der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} \vec{q} = \vec{F}(\vec{q}) \quad (3.43)$$

aufzufassen, welche nun in einem beliebigen Verfahren in der Zeit diskretisiert und somit numerisch integriert werden kann.

Es sei angemerkt, dass \vec{F} grundsätzlich aus Werten der diskretisierten Systemvariablen errechnet wird, jedoch räumlicher Kontext eine Rolle spielt, z.B. die in Abs. 3.3.4

eingeführte Absorptionsschicht oder auch ortsabhängige Flussfunktion oder sonstige Quellterme. Um die Notation nicht unnötig zu verkomplizieren, wird dieser Aspekt nicht explizit aufgeschrieben.

3.2.1. Expliziter Zeitschritt

Die Kombination von DG mit verschiedenen expliziten Runge-Kutta-Formeln zum Runge-Kutta-Discontinuous-Galerkin-Verfahren (RKDG) ist bereits von Cockburn (1998) ausführlich beschrieben. Dieses Verfahren ist für großskalige atmosphärische Anwendungen ohne herausgefilterte Schallwellen wegen des restriktiven CFL-Kriteriums ungeeignet. Daher kommt es nur in (räumlich und zeitlich) kleinskaligen bzw. sehr grob aufgelösten Simulationen selbstständig zum Einsatz. In der folgend beschriebenen semi-implizite Zeitintegration wird es für den nichtlinearen Anteil von \vec{F} eingesetzt, der die schnellen Wellen nicht beinhaltet.

Konkret kommen in dieser Arbeit optimale „strong stability-preserving“ Runge-Kutta-Verfahren (SSPRK) zum Einsatz, wie sie durch Spiteri und Ruuth (2002) für potentiell die Ordnung übersteigende Anzahl von Stufen beschrieben sind. Dabei wird eine Ordnung des Verfahrens von $k + 1$ gewählt, speziell RK mit zwei Stufen und Ordnung zwei (RK22) für Polynomgrad eins. Bei $k = 2$ kommt vorzugsweise SSPRK der Ordnung drei in fünf Stufen (RK35) zum Einsatz.

Ein explizites Runge-Kutta-Verfahren zur Berechnung des Zustandes $\vec{q}^{(i+1)}$, also der Gesamtheit aller Basiskoeffizienten der Systemvariablen in einem Vektor, mit Zeitabstand Δt aus dem aktuellen Zustand $\vec{q}^{(i)}$ zur Zeit t_i in S Stufen ist durch

$$\begin{aligned}\vec{F}_1 &= \vec{F}(t_i, \vec{q}^{(i)}) \\ \vec{F}_j &= \vec{F}\left(t_i + c_j \Delta t, \vec{q}^{(i)} + \Delta t \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} \vec{F}_s\right) \\ \vec{q}^{(i+1)} &= \vec{q}^{(i)} + \Delta t \sum_{j=1}^S b_j \vec{F}_j\end{aligned}\tag{3.44}$$

mit der allgemeinen Zeitableitungsfunktion $d\vec{q}/dt = \vec{F}(t, \vec{q})$ dargestellt, wie auch bei Schwetlick und Kretschmar (1991, S. 229) nachzulesen.

Im vorliegenden Anwendungsfall ist die DG-Zeitableitung \vec{F} nicht selbst explizit von der Zeit abhängig, wodurch sich das Verfahren um die nicht benötigten Faktoren c_j reduziert. Bei Einbindung von zeitabhängigen Effekten, wie z.B. vom Sonnenstand abhängigen Strahlungsantrieb im dynamischen Kern selbst, müsste dies hier berücksichtigt werden.

Für die beiden in dieser Arbeit eingesetzten Verfahren sind die Koeffizienten Spiteri und Ruuth (2002) zu entnehmen und ebenfalls in Form des Butcher-Tableaus in Tab. 3.3 aufgelistet.

Die Konvergenzeigenschaften des mit solch einem expliziten Zeitschritt versehenen DG-Verfahrens für das homogene Gleichungssystem Gl. 2.9 wurden in Cockburn (1998) geprüft und eine Konvergenzordnung von $k + 1$ festgestellt. Offen ist die Frage, wie sich dies auf das inhomogene Gleichungssystem übersetzt. Tatsächlich ist mit den Euler-Gleichungen schon die Stabilität einer analytischen Lösung für kleine k mit der unmodifizierten Methode problematisch. Den notwendigen Korrekturen und Prüfung des Konvergenzverhaltens der verbesserten Diskretisierung widmet sich Kap. 5.

| | | | |
|-----------|-----------------------------------|-----|-----------------|
| $c_1 = 0$ | $a_{11} \quad \dots \quad a_{1s}$ | 0 | $0 \quad 0$ |
| \vdots | $\dots \quad \ddots \quad \vdots$ | 1 | $1 \quad 0$ |
| c_s | $a_{s1} \quad \dots \quad a_{ss}$ | | $1/2 \quad 1/2$ |
| | $b_1 \quad \dots \quad b_s$ | | |

| | | | |
|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 0 | 0 | 0 | ... |
| 0.377 268 915 117 10 | 0.377 268 915 117 10 | 0 | ... |
| 0.754 537 830 234 19 | 0.377 268 915 117 10 | 0.377 268 915 117 10 | ... |
| 0.490 568 822 693 14 | 0.163 522 940 897 71 | 0.163 522 940 897 71 | ... |
| 0.787 843 030 143 11 | 0.149 040 593 948 56 | 0.148 312 733 847 24 | ... |
| | | | |
| | 0.197 075 963 844 81 | 0.117 803 165 097 65 | ... |
| ... | 0 | 0 | |
| ... | 0 | 0 | |
| ... | 0 | 0 | |
| ... | 0.163 522 940 897 71 | 0 | |
| ... | 0.148 312 733 847 24 | 0.342 176 968 500 08 | 0 |
| ... | 0.117 097 251 937 72 | 0.270 158 749 342 51 | 0.297 864 870 101 04 |

Tabelle 3.3.: Koeffizienten für Runge-Kutta-Verfahren im Butcher-Tableau, *oben links*: allgemeines Schema zur Einordnung der Koeffizienten, *oben rechts*: RK22, *Mitte/unten fortgesetzt*: RK35

3.2.2. Semi-impliziter Zeitschritt

Um nichthydrostatische Atmosphärenmodelle mit praktikablen Zeitschritten auf globaler Skala betreiben zu können, ist die von Giraldo (2005) zusammenfassend vollzogene Kombination von DG Diskretisierung im Raum mit semi-impliziter Zeitintegration angebracht.

Die Grundidee besteht in der Aufspaltung der Zeitintegration in einen impliziten und einen expliziten Anteil. Dazu wird eine Linearisierung $\bar{L}(\bar{q})$ von $\vec{F}(\bar{q})$ eingesetzt und die Zeitableitung in explizitem und implizitem Anteil formuliert:

$$\frac{d}{dt} \bar{q} = \underbrace{\left[\vec{F}(\bar{q}) - \bar{L}\bar{q} \right]}_{\text{nichtlinear, explizit}} + \underbrace{\bar{L}\bar{q}}_{\text{linear, implizit}} . \quad (3.45)$$

Der lineare Anteil, der die schnellsten Wellen des Lösungsraumes erfassen sollte, kann auf Kosten der Genauigkeit für die in atmosphärischen Anwendungen üblicherweise uninteressanten Schallwellen mit großem Zeitschritt stabil gelöst werden, während der um diese Wellen verminderte explizite Anteil die interessante dynamische Advektion mit diesem Zeitschritt akkurat integrierbar ist.

Der Beschreibung in Giraldo (2005) folgend, ist eine Klasse von Verfahren definiert, um aus den vergangenen Zuständen $\bar{q}^{(n-m)}$ zu den Zeitschritten $n - m$ mit $m \geq 0$ den

zukünftigen Zustand $\bar{q}^{(n+1)}$ mit Zeitabstand Δt zu bestimmen,

$$\begin{aligned} \bar{q}^{(n+1)} = & \overbrace{\sum_{m=0}^1 \alpha_m \bar{q}^{(n-m)} + \kappa \Delta t \sum_{m=0}^2 \beta_m \vec{F}(\bar{q}^{(n-m)})}^{\bar{q}_{\text{ex}}} \\ & + \delta_{\text{si}} \kappa \Delta t \sum_{m=-1}^2 \xi_m \bar{L} \bar{q}^{(n-m)} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Für die Rechnungen zu den in der vorliegenden Arbeit präsentierten Ergebnisse mit semi-implizitem Zeitschritt wurde das Verfahren BDF2A (Backward Difference Formula) eingesetzt, dessen Koeffizienten in Tab. 3.4 aufgelistet sind.

Die Auflösung von Gl. 3.46 nach $\bar{q}^{(n+1)}$ erfolgt für $\delta_{\text{si}} = 1$ über ein aus gegebenem \bar{q}_{rhs} zu bestimmendes \bar{q}_{tt} ,

$$\begin{aligned} \bar{q}^{(n+1)} = & \bar{q}_{\text{ex}} + \kappa \Delta t \bar{L} \sum_{m=-1}^2 \xi_m \bar{q}^{(n-m)} \Big| \cdot \xi_{-1}; + \sum_{m=0}^2 \xi_m \bar{q}^{(n-m)} \\ \Leftrightarrow & \underbrace{\xi_{-1} \bar{q}^{(n+1)} + \sum_{m=0}^2 \xi_m \bar{q}^{(n-m)}}_{\bar{q}_{\text{tt}}} = \underbrace{\xi_{-1} \bar{q}_{\text{ex}} + \sum_{m=0}^2 \xi_m \bar{q}^{(n-m)}}_{\bar{q}_{\text{rhs}}} \\ & + \kappa \Delta t \xi_{-1} \bar{L} \underbrace{\sum_{m=-1}^2 \xi_m \bar{q}^{(n-m)}}_{=\bar{q}_{\text{tt}}} . \end{aligned}$$

Das zu lösende lineare Gleichungssystem ist

$$(\bar{\text{Id}} - \kappa \Delta t \xi_{-1} \bar{L}) \bar{q}_{\text{tt}} = \bar{q}_{\text{rhs}} , \quad (3.47)$$

welches nach Bestimmung von \bar{q}_{tt} im Kontext der Vergangenheit den gewünschten neuen Systemzustand

$$\bar{q}^{(n+1)} = \frac{1}{\xi_{-1}} \left(\bar{q}_{\text{tt}} - \sum_{m=0}^2 \xi_m \bar{q}^{(n-m)} \right) \quad (3.48)$$

ergibt.

Ein Aspekt dieses Ansatzes ist die Nutzung von Zustandsvektoren $\bar{q}^{(n-m)}$ aus vorigen Zeitschritten für $m > 0$. Dies bedingt zum einen die Festlegung auf einen Zeitschritt, der zu den vorigen konsistent ist (unverändert), zum anderen müssen die vergangenen Zustände zu Beginn einer Simulation konstruiert werden. Ein einfacher Ansatz ist die Kopie des Anfangszustandes, was für Nichtgleichgewichtszustände natürlich fehlerhaft ist. Für im Vergleich zum Zeitschritt lange Zeitskalen der Simulationen mag dies vernachlässigbar sein. Trotzdem wird in dieser Arbeit ein aufwändigerer Ansatz verfolgt.

Vor Beginn der semi-impliziten Rechnung⁷ steht eine Anfangsphase unter Verwendung der vollen expliziten Methode, welche die passende Vergangenheit für die semi-implizite

| Parameter | α_0 | α_1 | κ | β_0 | β_1 | β_2 | ξ_{-1} | ξ_0 | ξ_1 | ξ_2 |
|-----------|------------|------------|----------|-----------|-----------|-----------|------------|---------|---------|---------|
| Wert | 4/3 | -1/3 | 2/3 | 2 | -1 | 0 | 1 | -2 | 1 | 0 |

Tabelle 3.4.: Koeffizienten für BDF2A, übernommen aus Giraldo (2005)

⁷ auch bei Neubeginn wegen Zeitschrittwechsel

Methode bestimmt. Der Fehler hier liegt lediglich in einer temporäre Inkonsistenz in der Behandlung der schnellen Wellen, welche in semi-impliziter Rechnung ohnehin fehlerbehaftet sind.

Wichtig für die praktische Umsetzung ist die Nutzung des von Saad und Schultz (1986) beschriebenen Algorithmus GMRES (Generalized Minimum Residual Method) zur iterativen Lösung von Gl. 3.47. Dadurch kann die Formulierung und direkte Invertierung der Linearisierung für das gesamte Modellgebiet als prinzipiell alle Elemente umspannende Matrix vermieden werden. Speziell bei den Euler-Gleichungen werden zur Behandlung der kritischen Kräfte in Vertikalrichtung die Elemente in Säulen gruppiert und für diese Säulen eine auf vertikale Wirkungen beschränkte Linearisierung der Gleichungen in Matrizenform definiert (siehe allgemeine Aufstellung dieser in Abs. B.1).

Für nicht zu große Zahl von Schichten im Modell können die Matrizen der vertikalen Linearisierung auch ohne Optimierung bezüglich dünner Besetzung einmalig invertiert werden und so als schneller Präkonditionierer für GMRES fungieren. Dadurch benötigt die globale Lösung deutlich weniger Iterationen und wird so stark beschleunigt, dadurch das semi-implizite Zeitschrittverfahren dem expliziten in der Recheneffizienz überlegen.

3.2.3. Skalierung von Einheiten

Für atmosphärische Anwendung auf globaler aber auch auf kleineren Skalen sind bestimmte Skalierungen der physikalischen Dimensionen von Raum, Zeit Masse und Temperatur hilfreich. Durch Wahl dieser Skalen kann die Spannbreite der Größenordnungen der numerischen Repräsentation der Systemvariablen reduziert werden, was hauptsächlich die iterative Lösung mit GMRES und somit die semi-implizite Zeitintegration durch schnellere Konvergenz stark beschleunigt.⁸

Eine naheliegende Wahl sind die Darstellung von Längen in km, von Zeit in Schritten von 4 s, von Masse in $Mt = 1 \cdot 10^9$ kg und Temperatur in 200 K. Dadurch ergeben sich für einen atmosphärischen Zustand nahe dem Boden bei 1000 hPa und 300 K folgende Werte

$$\begin{aligned}
 p &= 100\,000 \text{ Pa} = 1.6 \text{ Mt} / \text{km} (4\text{s})^2 (= 100 \text{ GN/km}^2) \\
 T &= 300 \text{ K} = 1.5 (200 \text{ K}) \\
 R &= 287 \text{ J/kg K} = 0.918 \text{ km}^2 / (4\text{s})^2 200 \text{ K} \\
 \rho &= 1.16 \text{ kg/m}^3 = 1.16 \text{ Mt} / \text{km}^3
 \end{aligned}
 \tag{3.49}$$

Eine solche interne Darstellung mit Werten in einer Größenordnung ist generell für Numerik mit begrenzter Genauigkeit hilfreich, auch unabhängig von der besseren Definition der die Iteration bestimmenden und gegenüber der Physik ignoranten Fehlermaße.

3.2.4. Zeitschrittbestimmung

Neben der Feststellung der zumindest für homogene Gleichungen ($\vec{r}(\vec{q}, \vec{x}) = 0$) in einer Dimension geltenden Konvergenzordnung von $k + 1$, formuliert Cockburn (1998) auch ein Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Kriterium als Bedingung an einen stabilen Zeitschritt für RKDG. Die Verallgemeinerung dessen auf mehrere Dimensionen ist aber leider nicht gegeben. Auch darum wird in dieser Arbeit letztlich eine heuristisch-empirische Formel genutzt, als Resultat von Anpassungen nach beobachteter numerischer Instabilität in verschiedenen Konfigurationen.

⁸ Eine Rechnung des linearen Pinty-Testfalles ohne Absorptionsschicht (Abs. 6.3) mit 20×10 Elementen mit $k = 1$ bis 50 000 s Modellzeit benötigt ohne Parallelisierung 47 s bei 2 GMRES-Iterationen in der Endphase, im Vergleich zu 90 s und 7 Iterationen ohne Skalierung.

Als Basis dienen die Betrachtungen von Cockburn (1998) in 1D und Kubatko et al. (2008) in 2D, um einen funktionierenden Ansatz in 1D, 2D und 3D zu finden. Die kritische Frage ist die Bestimmung der CFL-Zahl C_{CFL} in der grundlegenden Beziehung

$$\Delta t \leq C_{\text{CFL}} \min \left(\frac{\Delta x}{u} \right) \quad (3.50)$$

für erlaubte Zeitschritte in Abhängigkeit vom ungünstigsten Verhältnis von Auflösung Δx und Ausbreitungsgeschwindigkeit u . Dieses Verhältnis wird praktisch an den Quadraturpunkten eines Elementes ausgewertet und das Minimum über alle Richtungen bestimmt. Für einen expliziten Zeitschritt ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit die Summe aus Advektion und schneller Wellengeschwindigkeit, für einen impliziten Zeitschritt nur die Advektion als explizit gerechneter Anteil.

Erfahrungen während der Modellentwicklung führten letztlich zur direkten Anwendung der CFL-Zahl aus Cockburn (1998) in einer Dimension,

$$C_{\text{CFL,1D}} = \frac{1}{2k + 1} \quad (3.51)$$

und der Adaption des Faktors aus Kubatko et al. (2008) in zwei und drei Dimensionen,

$$C_{\text{CFL,2D}} = 0.684 \frac{1}{2^{1/(k+1)}} C_{\text{CFL,1D}} \quad (3.52)$$

$$C_{\text{CFL,3D}} = 0.324 \frac{1}{2^{1/(k+1)}} C_{\text{CFL,1D}} . \quad (3.53)$$

Die Vorfaktoren sowie ein weiterer freier Parameter, um bei Bedarf die CFL-Zahl zu skalieren, sind Zeuge für die empirische Natur der Zeitschrittbestimmung, die keinen Anspruch auf Allgemeingültigkeit erhebt.

Für die in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Ergebnisse gewährleisten die genannten Formeln stabile Simulationen ohne manuelle Eingriffe. Speziell für Läufe mit semi-impliziter Zeitdiskretisierung und iterativer Lösung des linearen Systems sind aber strengere Grenzen für Zeitschritte sinnvoll, um einen Kompromiss zwischen Schrittlänge und den durch die iterative Lösung bestimmten Rechenaufwand pro Schritt zu erreichen. Die zusätzliche Skalierung bezieht sich somit auch auf diesen Aspekt der Recheneffizienz unabhängig von numerischer Stabilität.

Der normale Operationsmodus der Umsetzung des beschriebenen Verfahrens als Computerprogramm prüft das CFL-Kriterium vor jedem Zeitschritt und passt die Länge dessen an, um stets nahe dem größten sicheren Zeitschritt zu sein. Im Idealfall erreicht dieser zeitlich adaptive Zeitschritt, dass das Modell ein gegebenes Problem mit minimaler Rechenzeit bewältigt und Zeiten hoher Dynamik auch fein aufgelöst gerechnet werden, während in ruhigeren Zeitabschnitten Rechenzeit gespart werden kann. Wirklich relevant ist dies für die durch die Advektionsgeschwindigkeit limitierte semi-implizite Integration, da die üblicherweise die Signalgeschwindigkeit dominierende schnellste Wellengeschwindigkeit (akustische Moden in der Atmosphäre) auch bei ruhiger Dynamik sehr kleine Zeitschritte für die explizite Rechnung erzwingt.

Ein praktischer Aspekt dieser Automatik ist, dass bei Variation von Modellparametern, insbesondere der Auflösung, keine Vorgabe des Zeitschrittes zum Erreichen einer stabilen Simulation erforderlich ist. Die Relevanz dieses Mechanismus verdeutlichen zwei Vorgriffe auf Simulationen in Kap. 7.

Beispiel mit vier Wochen Simulationszeit

Gegenstand von Abs. 7.3 ist die Entwicklung eines baroklin instabilen Grundstromes nach anfänglicher Störung mit einem Wellenpaket (Quadratsinus-Profil) oder gleichverteiltem Rauschen. Die Simulation deckt einen Modellzeitraum von vier Wochen (672 h) ab und zeigt den Zusammenbruch des instabilen Grundstromes sowie die Formierung eines dominierenden zyklonalen Wirbels. Die Dynamik beeinflusst den in Abb. 3.5 dargestellten semi-impliziten Zeitschritt deutlich.

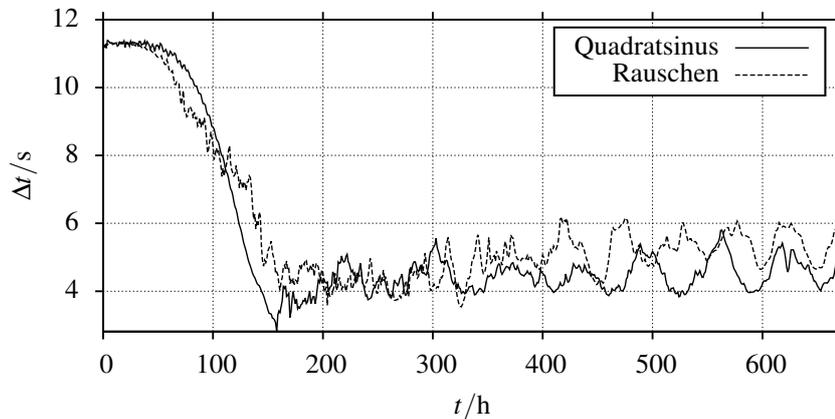


Abbildung 3.5.: Zeitreihe des semi-impliziten Zeitschritts der beiden Läufe zur Wirbelentwicklung (siehe Abs. 7.3)

Die Simulation beginnt mit einem Zeitschritt über 11 s, welcher sich in der von starker Dynamik geprägten ersten Woche auf 3 s bis 4 s verringert. Danach erholt er sich leicht und bewegt sich in den letzten zwei Wochen im Bereich zwischen 4 s und 6 s. Der kleinste Zeitschritt liegt nahe einem Drittel des zu Anfang gewählten Zeitschrittes. Ohne Anpassung wäre das Modell *vielleicht* stabil geblieben, aber eine hohe Zahl von nötigen GMRES-Iterationen hätte die Rechenzeit unnötig verlängert.

Beispiel mit zwei Jahren Simulationszeit

Die in Abs. 7.4 beschriebenen Simulationen betreffen ebenfalls einen gestörten baroklin instabilen Grundstrom, betrachten die Dynamik aber in geringerer Auflösung, um Modellzeiten von zwei Jahren zu erreichen. Auch daher sind die semi-impliziten Zeitschritte größer als im vorigen Beispiel. In Abb. 3.6 ist die Zeitreihe des semi-impliziten Zeitschrittes für die mit dem Kürzel „dzu08b00“ versehene Simulation zu finden, welche ebenfalls in der Anfangsphase ein Ausbrechen der baroklinen Instabilität simuliert, aber folgend wieder zu ruhigerer Dynamik findet.

Die Simulation beginnt mit einem Zeitschritt um 116 s, welcher sich in der von starker Dynamik aus der von barokliner Instabilität geprägten Anfangsphase bis auf 85 s verringert. Nach Ablauf der ersten drei Monate hat der stabile Zeitschritt ein Niveau um 125 s erreicht und sinkt bis zum (erfolgreichen) Ende der Simulation nicht mehr unter 115 s. Ein fester Zeitschritt hätte entweder in der dynamischen Anfangsphase die numerische Stabilität gefährdet oder für meiste Zeit der Simulation Rechenzeit verschwendet.

3.3. Randbedingungen

Die notwendigen Randbedingungen sind reduziert auf die Festlegung von äußeren Werten der Erhaltungsvariablen für die Berechnung des numerischen Flusses (Gl. 3.10). An

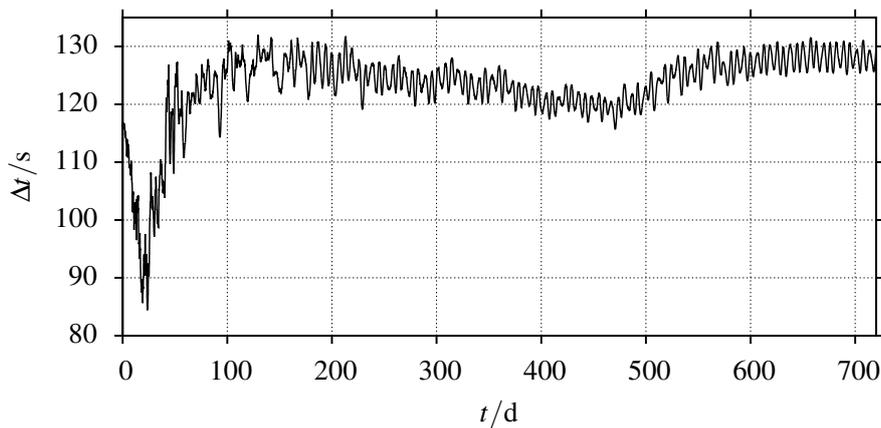


Abbildung 3.6.: Beispiel für Entwicklung von adaptivem semi-impliziten Zeitschritt, aus dem Lauf dzu08b00 zu Abs. 7.4

Randflächen ist jeweils der innere Wert ϑ_E einer Variablen durch Auswertung im Element gegeben, während der äußere Wert ϑ_G vorgegeben werden muss. Mit beiden Werten ist der numerische Fluss voll bestimmt, den Austausch mit einem virtuellen Nachbarlement in der Außenwelt beschreibend. Wesentlich sind in dieser Arbeit periodische und reflektive Randbedingungen, demonstriert in Abb. 3.7 für ein Flachwasserbecken⁹ ohne Corioliskraft.

3.3.1. Periodische Randbedingungen

Periodische Randbedingungen werden durch Identifikation gegenüberliegender Elemente mit dem jeweiligen virtuellen äußeren Element erreicht, Letztlich verschwindet dadurch der Rand vollends aus der Modellbeschreibung: Die Gitterstruktur ist nahtlos verknüpft, die Außenränder werden wie innere Grenzen gerechnet und nicht weiter unterschieden. Der Effekt ist in der ersten Spalte von Abb. 3.7 offenbar: Die im Volumen gestartete Welle tritt an einer Wand aus und sofort an der gegenüberliegenden wieder ein. Die Struktur des Interferenzmusters bleibt symmetrisch um den Startpunkt.

3.3.2. Reflektive Randbedingungen

Reflektive nicht-haftende Randbedingungen beginnen mit der Identifikation der Werte der Erhaltungsvariablen auf beiden Seiten,

$$\vec{q}_G = \vec{q}_E, \quad (3.54)$$

was für die betroffenen Variablen den numerischen Fluss \hat{f} gemäß Gl. 3.10 wieder auf den stetigen normalen Fluss \underline{f} reduziert und keinen Austausch zwischen den Elementen durch präsenten Sprungterm (Gl. 3.12) bewirkt. Jedoch ist für Impulsvariablen \vec{U} spezifisch die Reflexion gewünscht. Ein Impuls auf der Außenseite, welcher der Reflexion des inneren Impulses an der Grenzfläche entspricht,

$$\vec{U}_G = \vec{U}_E - 2\vec{v}_E(\vec{U}_E \cdot \vec{v}_E), \quad (3.55)$$

bewirkt dies.

⁹ siehe Abs. 2.7, explizite Rechnungen mit Gleichungen ohne Referenzfeld

Der Effekt von Gl. 3.54 und Gl. 3.55 ist wiederum in Abb. 3.7 nachzuprüfen, in Reinform in der dritten Spalte, in Mischung mit periodischem Rand in der zweiten. Deutlich ist der Bruch der einfachen Symmetrie der periodischen Randbedingungen und das Bild entspricht der Erwartung an Flachwasserwellen, die an einem festen Rand reflektiert werden.

Es sind zudem immer für bestimmte Gleichungssysteme spezifische Randbedingungen denkbar, welche durch Festlegung der äußeren Werte \vec{q}_G als Funktion der inneren \vec{q}_E sowie Ort \vec{x} und Normalenvektor \vec{v}_E definiert sind. Haftende („no-slip“) Randbedingungen, welche für viskose Fluide sinnvoll sind, werden in dieser Arbeit nicht benötigt.

3.3.3. Spezifische Randbedingungen für Euler-Gleichungen

Für die Euler-Gleichungen (Gl. 2.30 und auch Gl. 2.39 sowie Gl. 2.47) erfolgt die Reflektion an einer Grenzfläche für die Vorgabe von

$$\vec{q}_G = \begin{pmatrix} \rho_E \\ \Theta_E \\ \vec{U}_E - 2\vec{v}_E(\vec{U}_E \cdot \vec{v}_E) \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

an der Außenseite. Die Reflexion mit Referenzfeld erfordert kein Umdenken, da das stationäre Referenzfeld keine Windkomponente normal zur reflektierenden Grenzfläche aufweisen darf.

Speziell für das Euler-System ist aber eine Randbedingung, die ein äußeres Wärmebad simuliert. Sie kann genutzt werden, um einen bestimmten Temperaturgradienten im System zu halten, der ohne weiteren Einfluss von interner Dynamik (schnell) abgebaut würde. Eine möglichst harmonische Vorgabe der äußeren Temperatur ist ein Festhalten der einfachen potentiellen Temperatur θ_2 , die mit der jeweils innen anliegenden Dichte zu einem aktuellen Θ_2 verrechnet wird,

$$\vec{q}_G = \begin{pmatrix} \rho_E \\ \rho_E \theta_G \\ \vec{U}_E - 2\vec{v}_E(\vec{U}_E \cdot \vec{v}_E) \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

Die Temperaturreandbedingung wurde hier mit der reflektiven Grundbedingung Gl. 3.55 kombiniert, was einer später verwendeten Konfiguration entspricht.

Wichtig für die praktische Umsetzung ist hier das Detail, dass θ nicht analytisch, sondern in Darstellung des polynomialen Basisraumes vorgegeben wird. Andernfalls ist diese Randbedingung ein steter Quell unphysikalischer Störung.

3.3.4. Absorptionsschicht

Es ist mitunter wünschenswert, an den Rändern des Modellgebietes Reflexionen auslaufender Wellen zu unterbinden. Speziell gilt das in Atmosphärenanwendung für sich vertikal ausbreitende Wellen in einem relativ flachen Modellgebiet. In solch einem Fall soll die obere Randbedingung tendenziell offen sein und nicht rigoros geschlossen, um realistisch die Dynamik der unteren Atmosphäre unbeeinflusst von Rückwirkungen ausgehenden Impulses abzubilden.

Eine Annäherung an solch offene Ränder wird durch die Kombination von an sich reflektierenden Rändern mit einer absorbierenden sogenannten „Schwammschicht“ („sponge layer“) erreicht. Dabei wird gedanklich der Darstellung der von Klemp und Lilly (1978) eingeführten viskosen Dissipationsschicht in Durran und Klemp (1983) gefolgt, indem

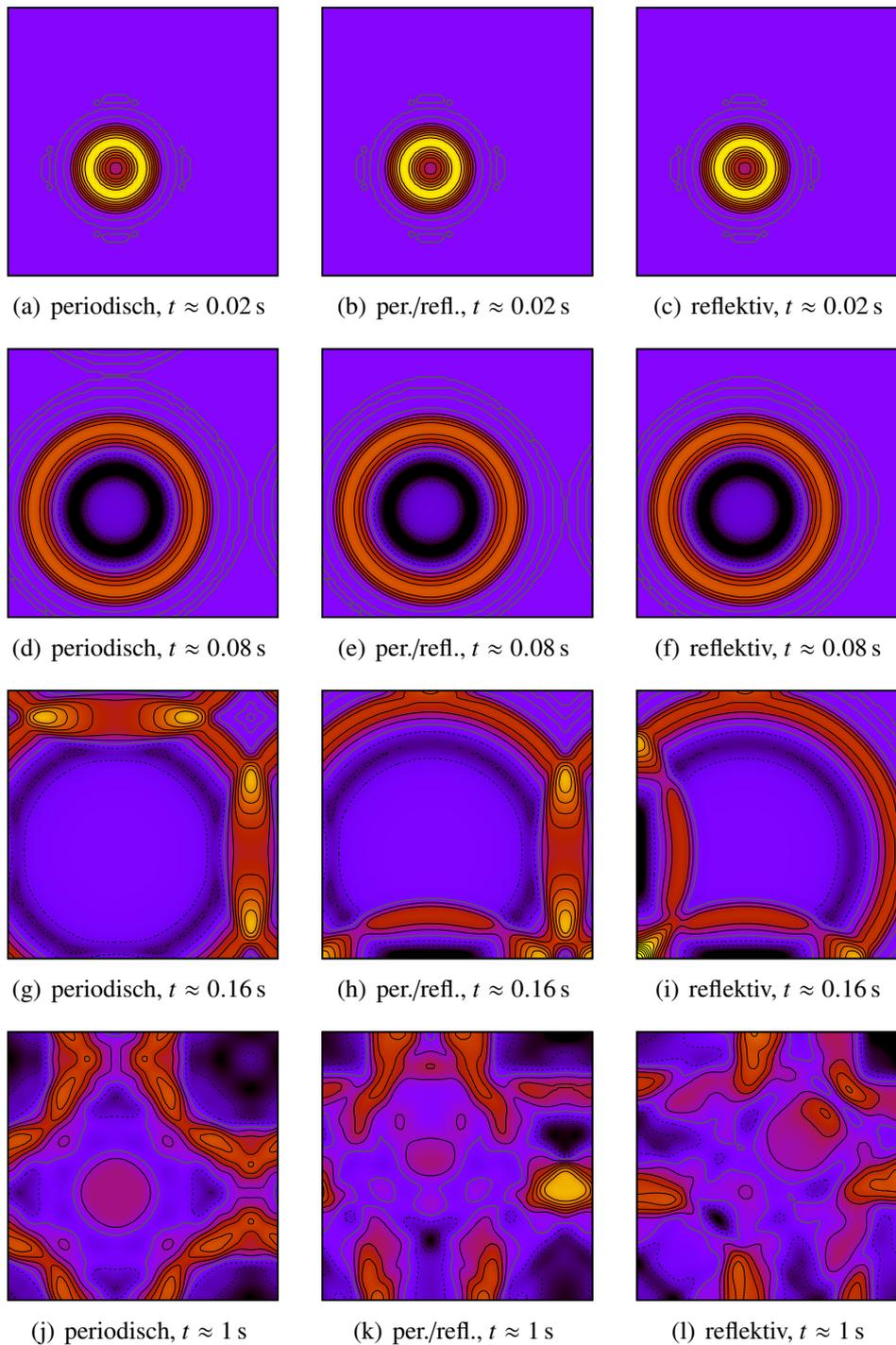


Abbildung 3.7.: Demonstration von periodischen und reflektierenden Randbedingungen im zwei-dimensionalen Flachwassermodell (Wasserhöhe h mit Konturintervall 0.01 m um graue Kontur bei 1 m, gestrichelt darunter, in einem Bassin von einem Meter im Quadrat), *links* in beide Richtungen periodisch, *mittig* in x (horizontal) periodisch und in y (vertikal) reflektierend, *rechts* beide Richtungen mit reflektierendem Rand; in den Reihen verschiedene Zeitpunkte

die Schicht als ein zusätzlicher Beitrag zum Quellterm des Differentialgleichungssystems gesehen wird,

$$\partial_t \vec{q} + \nabla \underline{f} = \vec{r} - \vec{\sigma}_{\text{sp}}(\vec{x}) \cdot (\vec{q} - \vec{q}_{\text{sp}}) . \quad (3.58)$$

Für semi-implizite Zeitintegration ist dabei zu beachten, dass die Absorptionsschicht im Allgemeinen nichtlinear auf \vec{q} wirkt, abhängig vom Referenzzustand \vec{q}_{sp} , auf den er sich bezieht. Des Weiteren ist dieser Referenzzustand als Polynom im Basisraum darzustellen. Ein nicht zum Polynomraum passender analytischer Zielzustand würde das Modell fortwährend zu einem unerreichbaren Zustand hin stören. Das Stärkeprofil $\vec{\sigma}_{\text{sp}}(\vec{x})$ ist als Vektorfeld definiert, damit jede Systemvariable ϑ mit spezifischer Stärke $\sigma_{\text{sp},\vartheta}$ unabhängig stark von der Absorptionsschicht beeinflusst werden kann. Die Komponente zu einer Systemvariable wird jeweils isoliert für einen betreffenden Rand und die senkrechte Richtung dazu definiert. die Schichtdicke d_{sp} , Gesamthöhe H mit Koordinate $z \in [0; H] \subseteq \mathbb{R}$ und einem Formparameter l , welcher bestimmt, ab wann die Absorption konstant mit voller Stärke wirkt. Diese mehrstufige Einstellung der Absorptionsstärke ist mittels der $(\cdot \ ? \ \cdot \ : \ \cdot)$ - Syntax zur Darstellung von bedingter Zuweisung kompakt ausgedrückt:

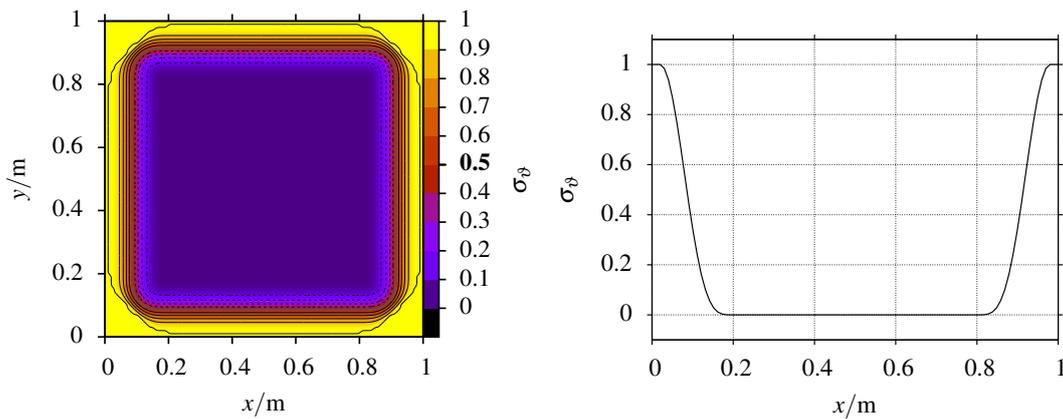
$$\begin{aligned} z_s &= H - d_{\text{sp}} \\ z_n(z) &= \frac{z - z_s}{d_{\text{sp}}} \\ \sigma_{\text{sp},\vartheta}(z) &= \sigma_{\text{spscale},\vartheta} \left(z \leq z_s \left\{ \begin{array}{l} ? \ 0 \\ : \ z_n(z) < l \left\{ \begin{array}{l} ? \ \sin^4 \left(\frac{1}{2} \pi \frac{z_n(z)}{l} \right) \\ : \ 1 \end{array} \right. \right. \right. \end{array} \right) . \end{aligned} \quad (3.59)$$

Die Stärken zu verschiedenen Rändern addieren sich bei Überlappung der Schichten, jedoch mit Limitierung auf die konfigurierte Maximalstärke. Hier ist $\sigma_{\text{spscale},\vartheta}$ ein der ausgewählten Variablen und dem aktuellen Randbereich zugeordneter Skalierungsfaktor, der es erlaubt die Absorptionsschicht selektiv zu gestalten. So kann z.B. nur der Vertikalimpuls am Oberrand des Modells absorbiert werden, andere Variablen inklusive des Horizontalimpulses aber unangetastet bleiben. Speziell kann damit auch durch $\sigma_{\text{sp},\rho} = 0$ an allen Rändern die Massenerhaltung unbeeinflusst gewahrt werden, wenn dies Priorität hat. Diese Skalierung beinhaltet auch einen gemeinsamen Faktor, welcher der Absorptionsschicht physikalische Dimension verleiht: Es ist die Dämpfung pro Zeiteinheit, womit für eine Impulsvariable die Absorption die Dimension einer Kraft bzw. Kraftdichte bekommt.

Eine Beispielkonfiguration einer Absorptionsschicht für das in Abb. 3.7 dargestellte Flachwasserproblem zeigt Abb. 3.8. Die Wirkung dieser Schicht ist in Abb. 3.9 zu sehen.

Einen Eindruck von der Wirkung solcher Schichten im Flachwassermodell vermittelt Abb. 3.9 als Variante von Abb. 3.7 mit absorbierenden Randschichten. Die eigentliche Natur der Ränder (reflektierend oder periodisch) wird durch die Absorptionsschicht weitgehend egalisiert: Die auslaufende Welle wird absorbiert und letztlich verschwindet ihre Energie mitsamt der transportierten Masse aus dem System.

Tatsächlich ist Vorsicht bei der Interpretation eines mit der Absorptionsschicht modifizierten Gleichungssystems geboten: Die zugefügten Quellterme sind eine Störung, die mitunter das Gleichungssystem inkonsistent werden lassen. Wenn in die Formulierung weiterer Gleichungen des Gesamtsystems eine der Gleichungen in ihrer homogenen Form eingeht, dann muss streng genommen das Gleichungssystem analytisch angepasst werden, wenn diese Gleichung nun mit der Absorptionsschicht einen Quellterm bekommt. Eine Umgehung dieser Problematik in der Literatur ist, dass die Schwammschicht nicht als Teil



(a) zweidimensionales Bild der Absorptionsstärke (Konturen alle 0.1 m, unter 0.5 gestrichelt)

(b) Schnitt bei $y = 0.5$ m

Abbildung 3.8.: Illustration der für alle Variablen geltenden Absorptionsstärke σ_q für das Flachwassereperiment in Abb. 3.9 (basierend auf dem von Abb. 3.7), Dicke der Schicht $d_{sp} = 0.2$ m und Formparameter $l = 0.9$

des Gleichungssystems, sondern als nachgeschalteter numerischer Filter im Zeitschritt formuliert wird (Giraldo, Restelli und Läuter, 2010). Letztlich kann mit beidem der gleiche Effekt erreicht werden. Es ist ein philosophischer Unterschied, ob man der Absorption eine physikalische Dimension gibt und sie als Kraft im Gleichungssystem betrachtet, oder losgelöst von diesem mathematisch ein sogenanntes „Nudging“ anwendet.

3.4. Diffusion

Das DG-Verfahren beinhaltet über den numerischen Fluss eine gewisse inhärente Diffusion, benötigt dafür aber auch keine explizite Diffusion zur Stabilisierung. Wenn physikalische motivierte Diffusion benötigt wird, so kann sie im einfachsten Fall als weiterer Teil der Flussfunktion eingebunden werden, der aus dem Gradienten der Systemvariablen bestimmt wird. Die wirkende Flussfunktion setzt sich aus dem Fluss des zu lösenden Differentialgleichungssystems $\underline{\bar{f}}_{\text{sys}}$ und einem Diffusionsfluss $\underline{\bar{f}}_{\text{diff}}$ zusammen,

$$\underline{\bar{f}} = \underline{\bar{f}}_{\text{sys}} - \underline{\bar{f}}_{\text{diff}}. \quad (3.60)$$

Der Formulierung einer ∇^2 -Diffusion dient dabei der Diffusionsflussvektor zu einer einzelnen Variablen ϑ

$$\vec{f}_{\text{diff},\vartheta} = \mu_{\vartheta} \nabla \vartheta \quad (3.61)$$

mit dem individuellen Diffusionsfaktor μ_{ϑ} . Durch die Flussdivergenz in Gl. 2.12 wird daraus der Term $\mu_{\vartheta} \nabla^2 \vartheta$. Dies ist eine einfache Variante der Diffusion, die ohne weitere Modifikation des Gleichungssystems, insbesondere der Hinzunahme weiterer Variablen für die Ableitungen, auskommt.

Die Diffusion ist einfach eine zusätzliche lineare Funktion.¹⁰ Bei Systemen mit zeitlich invariantem Referenzfeld, wie in Abs. 2.5 diskutiert, bezieht sich die Diffusion nur auf die Abweichung von der Referenz. Andernfalls wäre die Formulierung eines invarianten Referenzfeldes nicht sinnvoll. Allerdings ist die physikalische Aussage von Modellierung mit und ohne Referenzfeld unter Einbeziehung von Diffusion unterschiedlich.

¹⁰ Der Gradient ist linear in den Koeffizienten einer Variablen.

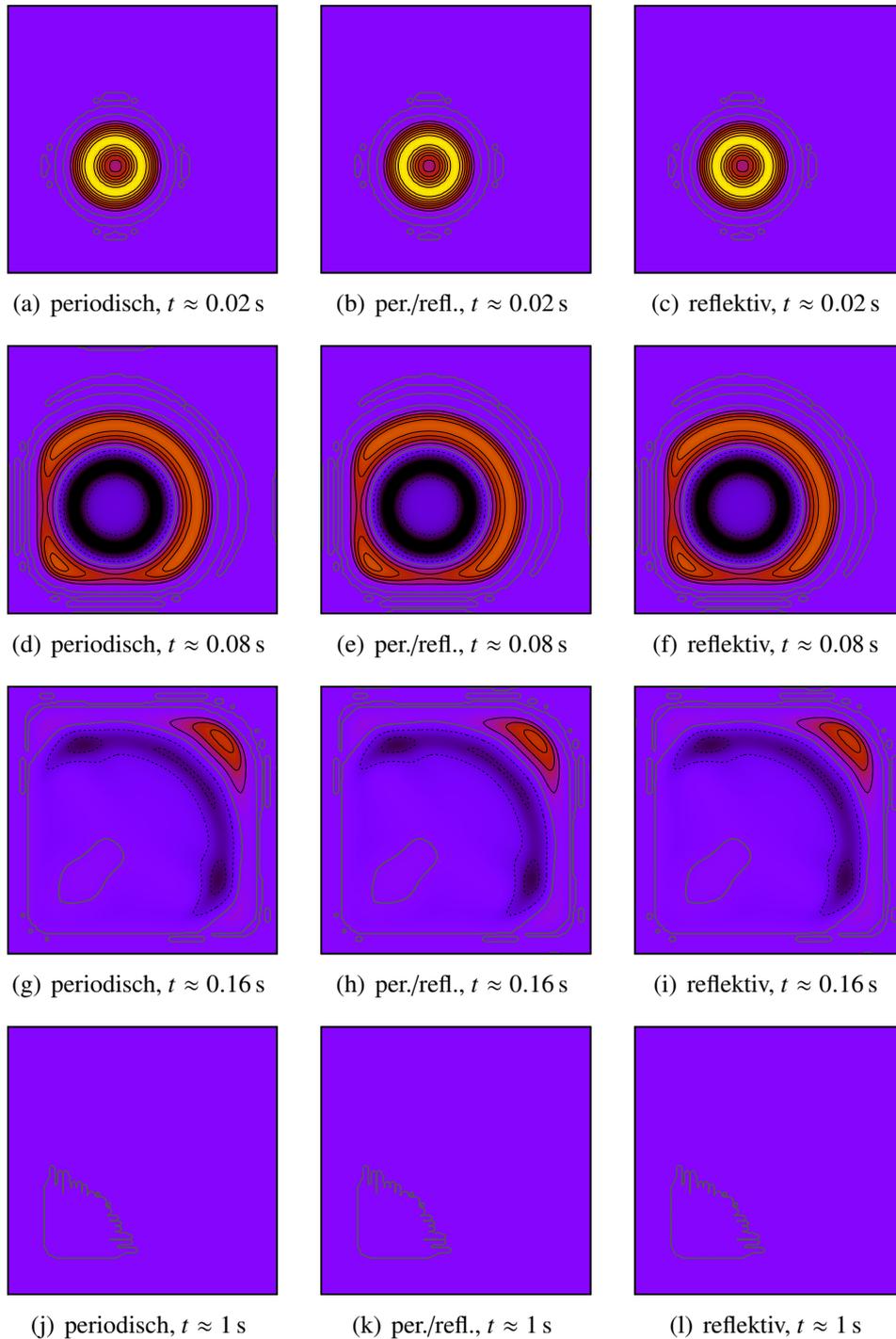


Abbildung 3.9.: Demonstration der Egalisierung von periodischen und reflektierenden Randbedingungen durch Absorptionsschicht im zweidimensionalen Flachwassermodell (Wasserhöhe h mit Konturintervall 0.01 m um graue Kontur bei 1 m, gestrichelt darunter, in einem Bassin von einem Meter im Quadrat), *links* in beide Richtungen periodisch, *mittig* in x (horizontal) periodisch und in y (vertikal) reflektierend, *rechts* beide Richtungen mit reflektierendem Rand; in den Reihen verschiedene Zeitpunkte

4. Atmosphärische Gleichgewichtszustände

Um Modellrechnungen für die folgenden Testfälle sowie weitere Untersuchungen starten zu können, werden atmosphärische Zustände benötigt, die in ihrer Rolle als Basis eines Startzustandes oder als Referenzfeld globales Gleichgewicht der beteiligten Kräfte beinhalten. Sie sollen stationäre Lösungen des betreffenden Gleichungssystems sein. In Ruhe bedeutet das für die beiden betrachteten atmosphärischen Modelle lediglich, dass die hydrostatische Balance gewahrt sein muss. Wenn ein von null verschiedenes Windfeld eingebunden wird, muss die volle Balance von unter Einbeziehung der Corioliskraft erfüllt werden.

Letzteres ist für die Flachwassergleichungen schnell formuliert, aber gerade die Problematik eines dreidimensional vorgegebenen geostrophischen Windfeldes, auch wenn dieses nur eine zonale Komponente aufweist, bedeutet für die Euler-Gleichungen einigen Aufwand und letztlich eine numerische Lösung der thermischen Windgleichung.

Die Formulierung der Felder erfolgt für den β -Kanal, wie er in Kap. 2 definiert wurde. Zur Festlegung eines Modellzustandes der Euler-Gleichungen mit $\vec{q}^T = (\rho, \Theta, \vec{U}^T)$ sind unter Anwendung von Gl. 2.13 zwei Zustandsgrößen des Gases sowie das Windfeld \vec{u} vonnöten.

4.1. Anforderungen an stationäre Zustände

Generell folgen für stationäre Zustände ($\partial_t \vec{q} = 0$) Bedingungen aus dem vollen Gleichungssystem Gl. 2.30, die in Gl. 2.38 festgehalten sind. Die Advektionsterme für Dichte und erhaltene potentielle Temperatur müssen verschwinden und, wenn dies auch für die Impulsadvektion gilt, der Druckgradient muss im Gleichgewicht mit den Kräften der rechten Seite bzw. der Impulsadvektion stehen.

Das Verschwinden der Advektion ist trivial sicher gestellt, wenn ein Zustand in Ruhe betrachtet wird, mit $\vec{u} = 0$. In diesem Fall bleibt aus Gl. 2.38 als einzige Bedingung das hydrostatische Gleichgewicht,

$$\nabla p = -\rho g \vec{k}. \quad (4.1)$$

Herleitungen der analytischen Ausdrücke für verschiedene ruhende hydrostatische Zustände können in Abs. B.2 nachgeschlagen werden.

Nichtverschwindende Winde $\vec{u} \neq 0$, welche offensichtlich selbst in einem stationären Zustand stationär sein müssen, unterliegen zusammen mit den Zustandsgrößen Anforderungen an die räumliche Struktur. Der in den Simulationen ausschließlich verwendete in x konstante rein zonale geostrophische Wind soll aus einem allgemeinen Ansatz begründet werden.

Wichtig ist in diesem Abschnitt die Sichtweise, die sich von der Lehrbuchdarstellung von Etling (2008) unterscheidet: Der Gleichgewichtswind soll nicht aus dem Druckfeld diagnostiziert werden, sondern dieses bestimmen. Für verschiedene Simulationen ist die Konstruktion von Gleichgewichtszuständen mit spezifischen Eigenschaften des Windfeldes zur Beeinflussung von Stabilitätseigenschaften gewünscht. Es gilt, zuerst die Freiheiten bei der Vorgabe eines Windfeldes zu bestimmen, und dann daraus und aus weiteren Vorgaben z.B. an den Temperaturverlauf die das Gleichgewicht haltenden Zustandsgrößen abzuleiten.

4.1.1. Verschwindende Advektion von Masse und potentieller Temperatur

Die erste Anforderung aus Gl. 2.38 an $\vec{u}(\vec{x})$ mit dem zugehörigen Impuls¹ $\vec{U}(\vec{x})$ ist

$$\overleftrightarrow{\nabla} \vec{U} = \overleftrightarrow{\nabla}(\rho \vec{u}) = 0 \Leftrightarrow \vec{u} \cdot \overleftarrow{\nabla} \rho + \rho \overleftrightarrow{\nabla} \vec{u} = 0. \quad (4.2)$$

Diese Bedingung ist leicht erfüllt, wenn man beide Terme auf null setzt, durch die Forderung der Orthogonalität des Windfeldes zum Dichtegradienten sowie die Forderung der verschwindenden Winddivergenz,

$$\vec{u} \cdot \overleftarrow{\nabla} \rho = 0 \wedge \overleftrightarrow{\nabla} \vec{u} = 0 \Rightarrow \overleftrightarrow{\nabla} \vec{U} = 0. \quad (4.3)$$

Mathematisch ist allerdings ein Wind mit Divergenz in Balance mit einem Dichtegradienten erlaubt.

Die Bedingung der verschwindenden Advektion von Θ in Gl. 2.38 stellt sich ähnlich dar:

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\nabla} \frac{\Theta}{\rho} \vec{U} = \overleftrightarrow{\nabla} \theta \vec{U} = 0 &\Leftrightarrow \vec{U} \cdot \overleftarrow{\nabla} \theta + \theta \underbrace{\overleftrightarrow{\nabla} \vec{U}}_{=0} = 0 \\ &\Leftrightarrow \overset{\rho \neq 0}{\vec{U} \cdot \overleftarrow{\nabla} \theta} = 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Hier ist die Bedingung in Kombination mit Gl. 4.2 klar: Ein Gradient der potentiellen Temperatur muss senkrecht zum Wind stehen.

4.1.2. Stationäre Impulsgleichung

Komplexer ist die Erfüllung der stationären Impulsgleichung in Gl. 2.38. Diese lautet

$$\overleftrightarrow{\nabla} \frac{1}{\rho} \vec{U} \otimes \vec{U} + \overleftrightarrow{\nabla} p \underline{\underline{\text{Id}}} = -f_c \vec{k} \times \vec{U} - \rho g \vec{k}. \quad (4.5)$$

Theoretisch ist ein dynamisches Gleichgewicht inklusive des nichtlinearen Advektionsterms denkbar, jedoch soll es hier ausreichen, Felder mit Verschwinden der Impulsadvektion zu betrachten. Dieses stellt sich mit Gl. 2.27 und Gl. 4.3 über

$$\overleftrightarrow{\nabla} \left(\frac{1}{\rho} \vec{U} \otimes \vec{U} \right) = \overleftrightarrow{\nabla}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \vec{u} \overleftrightarrow{\nabla}(\rho \vec{u}) + \rho(\vec{u} \cdot \overleftrightarrow{\nabla}) \vec{u} = 0 \quad (4.6)$$

und der Nebenbedingung $\rho \neq 0$ als

$$(\vec{u} \cdot \overleftrightarrow{\nabla}) \vec{u} = 0 \quad (4.7)$$

dar. Es steht hier die Forderung, dass das Windfeld beschleunigungsfrei ist, mit der Eulerschen Zerlegung der Zeitableitung

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \partial_t \vec{u} + (\vec{u} \cdot \overleftrightarrow{\nabla}) \vec{u} = 0. \quad (4.8)$$

Entlang einer Stromlinie dürfen sich weder Betrag noch Richtung des Windes ändern, entsprechend der üblichen Definition des geostrophischen Windes (Etling, 2008, Kap. 10).

¹ Auch weiterhin wird zur sprachlichen Kompaktheit der Begriff des Impulses auch auf die Systemvariable \vec{U} angewandt, auch wenn es sich um eine Impulsdichte handelt. Dies gilt auch für andere Systemvariablen, die generell als Dichten auftreten, aber, solange keine Missverständnisse drohen, nicht unbedingt als solche angesprochen werden.

Damit reduziert sich Gl. 4.5 auf das hydrostatische bzw. geostrophische Gleichgewicht zwischen Druckgradientenkraft und den Kräften der rechten Seite,

$$\overleftrightarrow{\nabla p} \underline{\underline{d}} = \overleftrightarrow{\nabla p} = -f_c \vec{k} \times \vec{U} - \rho g \vec{k}. \quad (4.9)$$

Dies stellt eine Bestimmungsgleichung für den Druckgradienten bei vorgegebenem Gleichgewichtswind dar.

Die Erdanziehungskraft schreibt einen vertikalen Gradienten des Druckes vor, damit auch einen vertikalen Gradienten von ρ oder θ bzw. Θ . Der Ansatz eines divergenzfreien Windfeldes schreibt daher nach Abs. 4.1.1 vor, dass dieser keine vertikale Komponente enthält.

Zusammengefasst sind an das Windfeld \vec{u} die Bedingungen

$$\vec{u} \cdot \vec{k} = 0 \quad \wedge \quad \overleftrightarrow{\nabla} \vec{u} = 0 \quad \wedge \quad \frac{d\vec{u}}{dt} = 0 \quad (4.10)$$

gestellt. Trivial sind diese für ein global konstantes Feld

$$\vec{u}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \text{const} \quad (4.11)$$

erfüllt. Allerdings sind auch variierende horizontale Windfelder erlaubt, solange sie divergenz- und beschleunigungsfrei sind,

$$\vec{u}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} u(\vec{x}) \\ v(\vec{x}) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

mit

$$\overleftrightarrow{\nabla} \vec{u} = \partial_x u + \partial_y v = 0 \quad \wedge \quad (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \begin{pmatrix} u \partial_x u + v \partial_y u \\ u \partial_x v + v \partial_y v \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.13)$$

Jedes Windfeld mit global konstanter Richtung, zu der der Gradient des Betrages $\zeta(\vec{x})$ senkrecht steht,

$$\vec{u}(\vec{x}) = \zeta(\vec{x}) \vec{u}_0 \quad (4.14)$$

$$\Rightarrow \quad \overleftrightarrow{\nabla} \vec{u} = \vec{u}_0 \cdot \overleftrightarrow{\nabla} \zeta(\vec{x}) \quad (4.15)$$

$$\wedge \quad (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \zeta(\vec{x}) (\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla}) \zeta(\vec{x}) \vec{u}_0 = \zeta(\vec{x}) \vec{u}_0 (\vec{u}_0 \cdot \overleftrightarrow{\nabla} \zeta(\vec{x})) \quad (4.16)$$

und somit

$$\vec{u}_0 \cdot \overleftrightarrow{\nabla} \zeta = 0 \Rightarrow \overleftrightarrow{\nabla} \vec{u} = 0 \wedge (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \vec{0}, \quad (4.17)$$

erfüllt ebenfalls die Bedingungen Gl. 4.10 und kann als Basis eines stationären Zustandes nach Gl. 2.38 dienen.

4.2. Wind ohne Corioliskraft

Ohne Wirken der Corioliskraft reduziert sich Gl. 4.9 auf Gl. 4.1. So ist im Kanalmodell mit in x periodischen aber dagegen in y reflektiven Randbedingungen die einfache Form des Grundstromes in zonaler Richtung mit Profil in y ,

$$\vec{u}(y) = \begin{pmatrix} u(y) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

frei mit horizontal invarianten hydrostatischen Zuständen kombinierbar, um stationäre Strömungen vorzugeben. Prinzipiell ist dies auch mit vertikaler Windscherung möglich, also $u(y, z)$, wird aber für die Anwendung in dieser Arbeit nicht benötigt.

4.3. Geostrophischer Wind

Für Rechnungen auf der β -Ebene kommt die Corioliskraft als Bestandteil der nötigen Gleichgewichte hinzu und es müssen auch horizontale Gradienten der Zustandsgrößen bestimmt werden, ausgehend von Gl. 4.9. Mit einem horizontalen Grundstrom aus Komponenten $u(\vec{x})$ und $v(\vec{x})$ stellt sich der Druckgradient wie folgt dar:

$$\vec{U} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho v \\ 0 \end{pmatrix} \wedge \vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \nabla p = \begin{pmatrix} f_c \rho v \\ -f_c \rho u \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho g \end{pmatrix} = \frac{P}{RT} \begin{pmatrix} f_c v \\ -f_c u \\ -g \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Tatsächlich ist die Richtung des den Druckgradienten Gl. 4.19 bestimmenden Windes im β -Kanal auf zonale Richtung beschränkt. Dies offenbart die Integrabilitätsbedingung des Gradienten entsprechend der mathematischen Regel, dass das Gradientenfeld eines Skalars rotationsfrei ist:²

$$\vec{\nabla} \times \nabla p = 0. \quad (4.20)$$

Die dritte Komponente der Rotation ergibt sich aus Gl. 4.19 zu

$$\begin{aligned} & -\partial_x \left(\frac{P}{RT} f_c u \right) - \partial_y \left(\frac{P}{RT} f_c v \right) = 0 \\ \Leftrightarrow & -f_c \left(\frac{P}{T} \partial_x u + u \frac{1}{T} \partial_x p - u \frac{P}{T^2} \partial_x T \right) = \frac{P}{T} f_c \partial_y v + v \frac{P}{T} \beta + f_c v \frac{1}{T} \partial_y p - f_c v \frac{P}{T^2} \partial_y T \\ \Leftrightarrow & -f_c \left(p \partial_x u + u \frac{P}{RT} f_c v - u \frac{P}{T} \partial_x T \right) = p f_c \partial_y v + v p \beta - f_c v \frac{P}{RT} f_c u - f_c v \frac{P}{T} \partial_y T \\ \Leftrightarrow & \frac{1}{T} \underbrace{\left(v \partial_y T + u \partial_x T \right)}_{\vec{u} \cdot \nabla T = 0} - \underbrace{\left(\partial_x u + \partial_y v \right)}_{\vec{\nabla} \vec{u} = 0} = v \frac{\beta}{f_c} \end{aligned}$$

$(\vec{u} \cdot \nabla T = 0$ wegen Orthogonalität nach Gl. 4.3 und Gl. 4.4), also

$$v \frac{\beta}{f_c} = 0 \quad (4.21)$$

Nach Gl. 4.21 ist die Definition eines Druckgradienten nur gegeben, wenn entweder der Wind rein zonal weht ($v = 0$) oder der Coriolisparameter sich nicht mit der Breite ändert

² Eine äquivalente Aussage liefert der Satz von Schwarz (Bronstein et al., 2001, Gl. 6.45): $\partial_x \partial_y p = \partial_y \partial_x p$.

($\beta = 0$). Der β -Effekt verhindert stationäre beschleunigungs- und divergenzfreie Winde mit jeglicher meridionalen Komponente. Solche sind nur unter Einbeziehung aller Terme von Gl. 2.38, mit einer Impulsadvektion im Gleichgewicht mit dem Druckgradientenkraft und Corioliskraft denkbar.

Ohne verschwindendes β ist die allgemeinste Form eines geostrophischen Windes als Teil eines stationären Zustandes tatsächlich der zonale Grundstrom mit einem Profil in y und z ,

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u(y, z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

4.4. Vorgegebener Grundstrom mit einstellbarer Baroklinität

Für potentiell barokline Zustände ist der Grundstrom $u(y, z)$ vorgegeben.³ Kennzeichen der Baroklinität ist dabei der vertikale Gradient des Windes, $\partial_z u$, in Bezug auf die konkrete endliche Differenz von u zwischen zwei Niveaus auch „thermischer Wind“ genannt. Zusammen mit entsprechender statischer Stabilität (Gl. B.75) bestimmt dieser Parameter die barokline Instabilität eines Zustandes (siehe Abs. 7.2). Zum Grundstrom ist ein passendes Druck- und Temperaturfeld zu finden, welches die Beziehung Gl. 4.19 erfüllt. Tatsächlich ist dies in der Darstellung mit p als vertikale Koordinate direkt zu berechnen, wie es Jablonowski und Williamson (2006) und auch Polvani et al. (2004) taten, aber nicht ohne weiteres auf das z -System übertragbar. Auch wenn nach Jablonowski und Williamson (2006) die Übertragung auf die z -Koordinate per Iteration bis zur Maschinengenauigkeit durchführbar ist, so bleibt doch, dass das ursprüngliche Windfeld nicht als $u(y, z)$, sondern als $u(y, p)$ formuliert wäre. Damit geht der direkte Zugriff auf den thermischen Wind im z -System verloren. So wird z.B. die Aufstellung von idealisierten Zuständen mit global konstantem $\partial_z u$ erschwert.

Der hier vorgestellte Ansatz zur Bestimmung eines im kompletten Kanal geostrophisch balancierten Anfangszustandes findet auf numerischem Weg mit entsprechenden Randvorgaben für die vertikale Struktur von Druck und Temperatur in einer Säule zu einem vorgegebenen Windfeld die passenden Druck- und Temperaturfelder, die Gl. 4.19 erfüllen. Dazu wird aus Gl. 4.19 die thermische Windgleichung (Etling (2008, Gl. 10.3)) hergeleitet und diese als partielle Differentialgleichung für die Temperatur gelöst. Tatsächlich ergibt sich das Druckfeld beiläufig: Die numerische Lösung mittels der Charakteristikenmethode identifiziert die Charakteristiken mit den Isobaren. Letztlich wird die Gleichung wie auch im p -System auf Kurven bzw. Flächen konstanten Druckes gelöst.

Zur partiellen Differentialgleichung für die Temperatur gelangt man durch die Eigenschaft der bereits behandelten Rotationsfreiheit des in Gl. 4.19 dargestellten Gradienten des skalaren $p(y, z)$,

$$\vec{\nabla} \times \nabla p = -\vec{\nabla} \times \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p}{RT} f_c u \\ \frac{p}{RT} g \end{pmatrix} = 0. \quad (4.23)$$

Mit dem zonal invarianten Feld verschwinden der zweite und dritte Term der Rotation.

³ Siehe auch Abs. A.1.

Es bleibt der erste Term, der die gewünschte Beziehung liefert,

$$\begin{aligned}
& \partial_y \frac{p}{RT} g = \partial_z \frac{p}{RT} f_c u \\
\Leftrightarrow & g \left(\frac{1}{T} \partial_y p - \frac{p}{T^2} \partial_y T \right) = f_c \left(\frac{p}{T} \partial_z u + \frac{u}{T} \partial_z p - \frac{pu}{T^2} \partial_z T \right) \\
\Leftrightarrow & -\frac{g f_c}{RT^2} u - \frac{g}{T^2} \partial_y T = \frac{f_c}{T} \partial_z u - \frac{g f_c}{RT^2} u - \frac{f_c}{T^2} u \partial_z T \\
\Leftrightarrow & \partial_z u = \frac{u}{T} \partial_z T - \frac{g}{f_c T} \partial_y T . \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Diese Form des Zusammenhanges zwischen Temperatur und Wind, die „thermische Windgleichung“, entspricht der gebräuchlichen Darstellung, z.B. in Etling (2008, Gl. 10.3), mit Blick auf die Bestimmung des thermischen Windes für einen zonalen Grundstrom. Speziell wird dazu in Etling (2008) noch der Term zum vertikalen Temperaturgradienten vernachlässigt und folgend die „thermische Windbeziehung“ benannt. Hier ist eine andere Sichtweise auf diese Gleichung angebracht. Der Wind ist gegeben, gesucht ist die Temperatur. In diesem Bild ist Gl. 4.24 eine homogene partielle Differentialgleichung für $T(y, z)$, die auch in der Standardform $F(T, \partial_y T, \partial_z T, y, z) = 0$ dargestellt werden kann,⁴

$$F(T, \partial_y T, \partial_z T, y, z) := \partial_y T - \frac{f_c(y)}{g} u(y, z) \partial_z T + \frac{f_c(y)}{g} \partial_z u(y, z) T = 0 . \tag{4.25}$$

Der Lösungsansatz anhand der Methode der Charakteristiken folgt der Darstellung in Kapitel 3 von Evans (1998) mit der Reinterpretation von F auf einer Kurve mit dem Kurvenparameter s . Aus Funktionen der Variablen (y, z) werden damit die neu benannten Terme $p_y(s)$, $p_z(s)$ und $Z(s)$,

$$\begin{aligned}
y & := y(s); & z & := z(s) \\
p_y(s) & := \partial_y T(y(s), z(s)); & p_z(s) & := \partial_z T(y(s), z(s)) \\
Z(s) & := T(y(s), z(s)) .
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Die Schreibweise der partiellen Differentialgleichung Gl. 4.25 ändert sich damit zu

$$F(Z, p_y, p_z, y, z) := p_y - \frac{f_c u}{g} p_z + \frac{f_c \partial_z u}{g} Z = 0 . \tag{4.27}$$

Aus dieser Form kann nun das auf den charakteristischen Kurven $(y(s), z(s))$ zu Gl. 4.25 äquivalente gewöhnliche Differentialgleichungssystem mit den Variablen y , z , Z , p_y und p_z formuliert werden. Es gilt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} y & = \frac{\partial F}{\partial p_y}; & \frac{d}{ds} p_y & = -\frac{\partial F}{\partial Z} p_y - \frac{\partial F}{\partial y} \\
\frac{d}{ds} z & = \frac{\partial F}{\partial p_z}; & \frac{d}{ds} p_z & = -\frac{\partial F}{\partial Z} p_z - \frac{\partial F}{\partial z} \\
\frac{d}{ds} Z & = p_y \frac{d}{ds} y + p_z \frac{d}{ds} z
\end{aligned} \tag{4.28}$$

⁴ Es wird Wert darauf gelegt, in den Termen Brüche möglichst zu vermeiden, um die Allgemeinheit von Lösungen nicht einzuschränken. Sowohl $\partial_z u$ als auch f_c dürfen explizit gleich null sein. Dagegen ist $g > 0$ im Ansatz immanent.

mit den partiellen Ableitungen

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial Z} &= \frac{f_c \partial_z u}{g}; \quad \frac{\partial F}{\partial p_y} = 1; \quad \frac{\partial F}{\partial p_z} = -\frac{f_c u}{g} \\ \frac{\partial F}{\partial y} &= -\frac{p_z}{g} \partial_y (f_c u) + \frac{Z}{g} \partial_y (f_c \partial_z u) \\ \frac{\partial F}{\partial z} &= -\frac{p_z}{g} f_c \partial_z u + \frac{Z}{g} f_c \partial_z \partial_z u.\end{aligned}\quad (4.29)$$

Dieses muss nun zwischen einem Zielpunkt (y_1, z_1) und dem zugehörigen Startpunkt (y_0, z_0) auf der Charakteristik integriert werden, um schließlich das Temperaturfeld $T(y, z) = Z(s)$ zu erhalten.

Prinzipiell müsste auch der Druckgradient ausgehend vom Randwert entlang der Charakteristik integriert werden, jedoch löst sich diese Rechnung trivial auf,

$$\frac{d}{ds} p = \partial_y p \cdot \frac{d}{ds} y + \partial_z p \cdot \frac{d}{ds} z = -\rho f_c u + \rho g \frac{f_c u}{g} = 0. \quad (4.30)$$

Der Druck ist auf der Charakteristik unverändert. Es gilt

$$p(y, z) = p(y_0, z_0). \quad (4.31)$$

Die charakteristischen Kurven der thermischen Windgleichung sind identisch mit den Isobaren des zu bestimmenden balancierten Zustandes. Obwohl der Druck nicht selbst in Gl. 4.25 vorkommt, ist der Wert von $p(y, z)$ durch die Charakteristiken dieser mit einem Randwert $p(y_0, z_0)$ verbunden. Des Weiteren ist durch die gewählte Formulierung $dy/ds = 1$ und so eine Identifikation des Kurvenparameters s mit der Koordinate y möglich.

Für p sowie T und die Ableitungen $\partial_y T$ und $\partial_z T$ (also die umbenannten Terme Z , p_y und p_z) müssen Randwerte bei festzulegendem (y_0, z_0) angegeben werden. Dabei besteht gewisse Freiheit in der Definition der Mannigfaltigkeit aller Randpunkte (y_0, z_0) . Dienlich ist die Wahl eines festen y_0 und die Vorgabe von Werten der zugehörigen Luftsäule. Werte von p und T (bzw. Z) sowie $\partial_z T$ (bzw. p_z) können für eine ruhende Atmosphäre errechnet werden, während die Horizontalableitung der Temperatur wiederum aus der ursprünglichen thermischen Windgleichung folgt, mit

$$\partial_y T = \frac{f_c}{g} (u \partial_z T - T \partial_z u). \quad (4.32)$$

Dieser Ansatz für die Randwerte ist gültig, da eine rein horizontale Strömung in geostrophischem Gleichgewicht lediglich auf die horizontalen Gradienten der Zustandsvariablen innerhalb einer Säule wirkt; der vertikale Verlauf dieser bleibt durch die Hydrostatik bestimmt.

Generell gilt es nun, das System Gl. 4.28 für T und seine Ableitungen von (y_0, z_0) nach (y_1, z_1) entlang der Charakteristik zu integrieren. Dabei gibt es zumindest das Problem, dass zu einem (y_1, z_1) die Startkoordinate z_0 zu festgelegtem y_0 nicht ohne Weiteres bekannt ist. Dazu wäre eine analytische Form der Isobaren notwendig, die Gl. 4.28 erfüllt. Das entsprechende Integral

$$\int_{z_0(y_0)}^{z(y)} dz' = -\frac{1}{g} \int_{y_0}^y f_c(y') u(y', z(y')) dy' \quad (4.33)$$

ist aber implizit in Bezug auf das gesuchte $z(y)$ und erfordert numerische Lösung, solange der Zonalwind u tatsächlich höhenabhängig ist. Im p -System sind die Isobaren trivial gegeben und dieses Problem stellt sich nicht, solange man nicht später ins z -System wechseln möchte. Bei der reinen Rechnung im z -System beginnt an dieser Stelle die numerische Auflösung von Gl. 4.25.

4.4.1. Lösungsalgorithmus

Zusammengefasst erfolgt die Bestimmung der Felder $p(y, z)$ und $T(y, z)$ zu gegebenem $u(y, z)$ und Randwerten von p und T bei y_0 für alle z (inklusive Ableitungen nach z) in folgenden Schritten:

1. Identifikation des Kurvenparameters s mit Koordinate y
2. Integration von dz/ds aus Gl. 4.28 von y bis y_0 , um z_0 zu erhalten
3. Setzen der Randwerte $p(y_0, z_0)$, $T(y_0, z_0) = Z(y_0)$ und $\partial_z T(y_0, z_0) = p_z(y_0)$, Bestimmung von $\partial_y T(y_0, z_0)$ aus Gl. 4.32
4. Festhalten von $p(y_0, z_0) = p(y, z)$
5. Integration des kompletten Systems von Gl. 4.28 von y_0 bis y

Die Integration selbst kann mit einem beliebigen geeigneten Schrittverfahren numerisch erfolgen. Als Standardverfahren eignet sich ein Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung mit adaptivem Zeitschritt. Kriterium dabei ist eine vom Nutzer festgelegte maximale Änderung von z aus einer Abschätzung mit dz/ds zusammen mit einer unabhängigen Obergrenze für die Schrittweite in y , sollte die Charakteristik entsprechend eben sein.

Eine Diagnostik für die Genauigkeit der Lösung ist die Abweichung der schlussendlich erreichten Koordinate z vom Startpunkt, wobei die Definition eines passenden Grenzwertes nicht offensichtlich ist. Ein grundlegender Test ist dagegen der Vergleich der aus dem Gleichungssystem bestimmten Gradienten mit dem aus zentralen Differenzen bestimmten Gradienten bei hinreichend genauer Abtastung eines Modellgebietes.

Für die Definition der Randwerte ist die Wahl der Position y_0 der Randwertsäule frei. Zur Minimierung der Integrationswege für die Bestimmung eines kompletten Zustandes wird dazu die Mitte der Kanalbreite festgelegt. Weiterhin ist der hydrostatische Basiszustand die mehrfach polytrope Atmosphäre aus Abs. B.2.4, wodurch vertikale Schichtungen definierbar sind, die auch zusammen mit dem frei festgelegten zonalen Windfeld Bezug zu realen Verhältnissen der Atmosphäre aufweisen.

Ein Ergebnis dieses Verfahrens ist in Abb. 4.1 dargestellt. Die Basis dieser Darstellungen ist ein Jet als Vorgabe eines Windes mit eingengtem Quadratsinusprofil in x sowie eines halben Quadratsinus in z (Tab. A.1). Die Variablen sind entlang der Isobaren bestimmt, deren geneigte Form sich durch die Wahl einer groben vertikalen Abstufung in der Farbhinterlegung der Konturen bei jeder Variablen zeigt. Die Übersicht bietet eine Gelegenheit, sich die Relationen der Terme von Gl. 4.25 zu verdeutlichen (Windprofil mit vertikalem Gradient, Druck- und Temperaturprofil inklusive Gradienten von letzterem). Insbesondere die Korrelation von vertikalem Windgradient Abb. 4.1(b) und meridionalen Temperaturgradient Abb. 4.1(e) ist kennzeichnend für das barokline geostrophische Gleichgewicht.

Zudem ist ein Punkt ebenso offenbar: Das Modellgebiet ist auf $z \in [0; 10]$ km beschränkt, doch verlassen die mit den Werten in der zentralen Säule verknüpften Isobaren

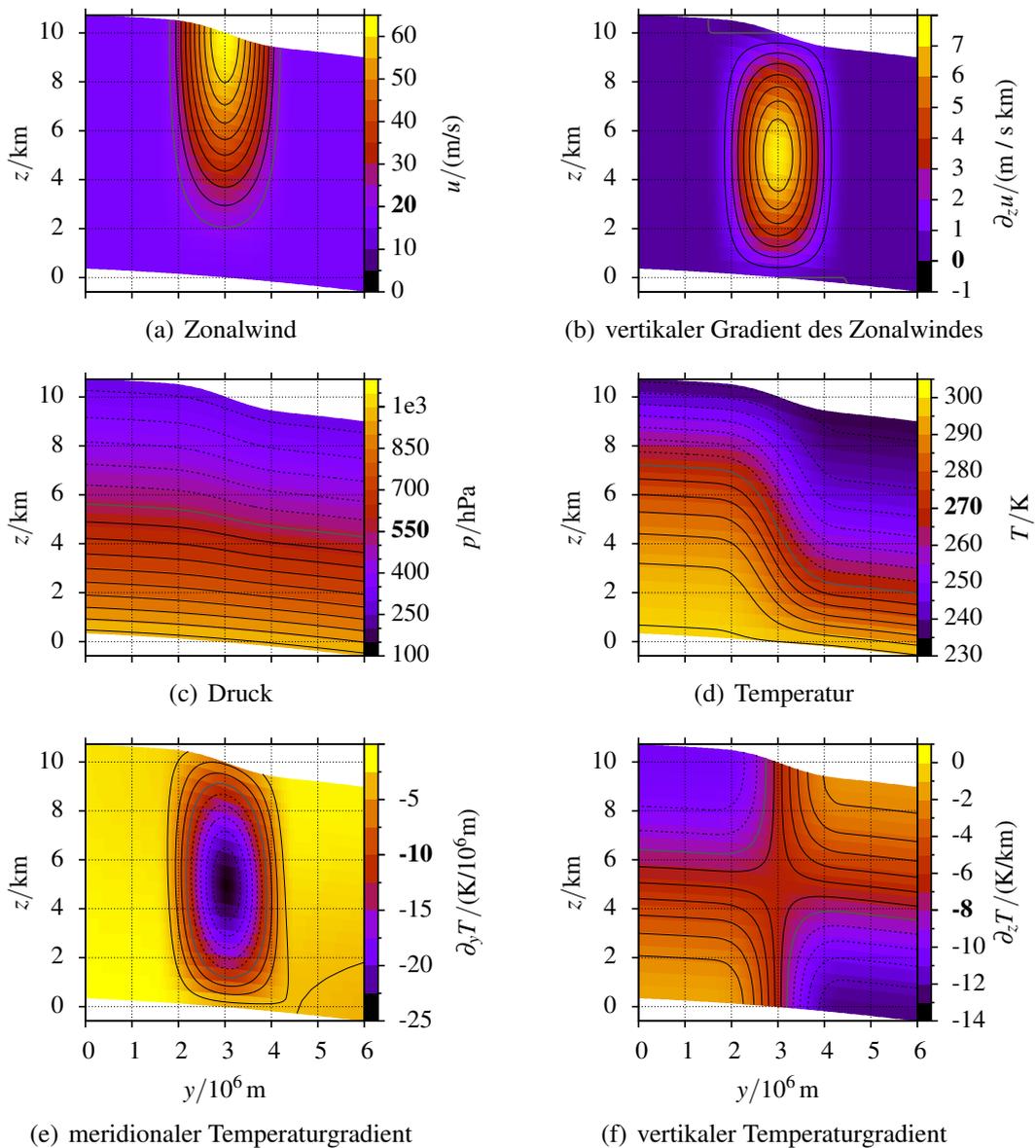


Abbildung 4.1.: Ansichten eines baroklinen Zustandes mit lokalisiertem Jet (ansteigende Flanke bis zum oberen Modellrand) im Höhen-Breiten-Schnitt, wie sie auf Isobaren numerisch errechnet wurden, dargestellte Größen mit direktem Bezug zu Gl. 4.25, Konturen in Korrelation zu den Anstrichen auf der Farbskale, graue Zentralkontur beim fettgedruckten Wert, Konturen darunter gestrichelt

dieses nach oben und unten. Gleichzeitig liegt offensichtlich der bestimmende Randwertebereich in der Kanalmitte für Datenpunkte, die noch nicht abgedeckt sind, außerhalb des Höhenintervalls. Dies spielt eine Rolle für die Vorgabe geeigneter Windfelder.

4.4.2. Zulässige Windfelder und ihre Definition außerhalb des Modellgebietes

In der Lösung der thermischen Windgleichung werden die erste sowie die zweite Ableitung des Zonalwindes $u(y, z)$ in Vertikalrichtung verwendet. Diese sollten somit stetig sein, um sinnvolle Lösungen zu erhalten. Tatsächlich wird die Methode auch für unzulässige Windfelder Lösungen, insbesondere solche mit Unstetigkeiten in der Temperatur, errechnen. Jedoch sind diese nicht als Lösungen der thermischen Windgleichung nutzbar. Das Feld $u(y, z)$ muss also im Modellgebiet nach y und z stetig differenzierbar sein, wobei die Ableitung nach z wiederum in beide Richtungen stetig differenzierbar sein sollte. Die Relevanz der analytischen Bedingungen hängt von der Modellauflösung ab: Die Abtastung des analytischen Zustandes durch die räumliche Diskretisierung kann durchaus die Problembereiche vermeiden und im Ergebnis eine geglättete Funktion darstellen.

Eine wichtige Folgerung aus dem gewählten Lösungsansatz ist aber, dass die Forderung nach stetiger Differenzierbarkeit von $u(y, z)$ nicht am Rand des Modellgebietes endet. Die Randwerte für die Isobaren sind auf einer Säule zu einem festen y_0 definiert. Bei geneigten Isobaren liegen deren z_0 in dieser Säule potentiell außerhalb der Modellgrenzen (siehe Abb. 4.1). Dies ist für die betrachteten hydrostatischen Basiszustände unproblematisch. Diese können für alle z , auch $z < 0$ analytisch ausgewertet werden und erzielen physikalisch sinnvolle Werte. Für die potentiell begrenzten Profile, aus denen der Wind aufgebaut ist, ist allerdings zumindest in Vertikalrichtung eine Fortsetzung auch außerhalb des Modellgebietes vonnöten, die stetige zweite Ableitungen erlaubt. Eine einfache Methode dazu ist die Wahl von Gl. A.6 bei der Definition des Vertikalverlaufes aus Gl. A.4. Grundsätzlich hat man bei dieser Fortsetzung gewisse Freiheiten, die jeweils durchaus das Ergebnis beeinflussen. Ein geostrophisch balancierter Zustand ist also nicht allein durch das Windfeld und die Randwertsäule innerhalb des Modellgebietes bestimmt, sondern auch durch deren gedachte Fortsetzung außerhalb.

4.4.3. Spezialfall konstanten thermischen Windes

Ein Spezialfall für die Analyse der baroklinen Instabilität ist ein Feld mit global konstantem Basiswind und einem darauf aufbauenden Verlauf durch einen global konstanten thermischen Wind,

$$u(y, z) = u_0 + u_{th}z, \quad (4.34)$$

welcher in idealer Weise innerhalb und außerhalb des Modellgebietes differenzierbar ist, mit $\partial_z u = u_{th}$. Eine Folge davon ist, dass mit $\partial_z \partial_z u = 0$ die Ableitung von $\partial_z T$ auf der Isobaren verschwindet (wegen des Termes $\partial F / \partial z$ in Gl. 4.29). Die Vertikalstruktur der Randtemperatur wird unverändert fortgesetzt. Somit ist mit einer einfach-polytropen Vorgabe am Rand die Schichtung der gesamte Atmosphäre konstant vorgegeben.

4.5. Barotroper Grundstrom als analytischer Spezialfall

Eine Spezialisierung des im Allgemeinen baroklinen Feldes mit geostrophischem zonalen Grundstrom, welches numerischer Formulierung bedarf, sind barotrope Felder. Diese sind tatsächlich auch im z -System analytisch bestimmbar und bieten eine Möglichkeit der Verifikation der numerischen Lösung. Die grundlegende Bedingung für ein barotropes

Feld ist die Parallelität von Druck- und Temperaturgradient und somit auch Parallelität von Isobaren und Isothermen, welche durch

$$\nabla p \times \nabla T = \rho \begin{pmatrix} 0 \\ -f_c u \\ -g \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \partial_x T \\ \partial_y T \\ \partial_z T \end{pmatrix} = \rho \begin{pmatrix} -f_c u \partial_z T + g \partial_y T \\ g \partial_x T \\ f_c u \partial_x T \end{pmatrix} = 0 \quad (4.35)$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} \partial_x T &= 0 \\ g \partial_y T &= f_c u \partial_z T \end{aligned} \quad (4.36)$$

gegeben ist. Tatsächlich ist der Zusammenhang der Temperaturgradienten in Gl. 4.36 identisch mit der bereits auf anderem Wege hergeleiteten thermischen Windgleichung (Gl. 4.24) unter der Bedingung des höhenkonstanten Windes ($\partial_z u = 0$) und bei Betrachtung von ohnehin zonal konstanten Variablen.

Eine triviale Lösung von Gl. 4.36 ist eine komplett isotherme Atmosphäre. Eine andere ist die ruhende hydrostatische Atmosphäre mit $u = 0$ und $\partial_y T = 0$. Bei finitem $\partial_z T$ kommt horizontale Variation der Temperatur hinzu. Letztlich gilt es hier, eine analytische Form der mehrfach-polytropen Atmosphäre mit barotropem Windfeld im geostrophischen Gleichgewicht aufzustellen. Eine Atmosphäre bestehend aus einer Schicht mit global konstanter Vertikalableitung der Temperatur lässt sich direkt mit Hilfe von Gl. 4.36 ausrechnen, ausgehend von der horizontalen Rechnung in einer z -Ebene (z.B. am Boden) und anschließender Integration der Hydrostatik in der Höhe mit dem gegebenen konstanten $\partial_z T$. Jedoch ist in einer Atmosphäre mit mehreren polytropen Schichten (siehe Abs. B.2.2) dieses Vorgehen erschwert, da sich die Grenzen der Schichten durch das geostrophische Gleichgewicht verschieben. Daher erfolgt die analytische Formulierung von barotropen Zuständen mit vorgegebenem zonalen Grundstrom als analytisch lösbarer Spezialfall der zuvor numerisch gelösten thermischen Windgleichung.

Mit $\partial_z u = 0$ im Sinn stellt sich das charakteristische System Gl. 4.28 von Gl. 4.25 bzw. Gl. 4.27 stark vereinfacht dar. Einsetzen der entsprechenden Ableitungen von Gl. 4.27 ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} y &= 1; & \frac{d}{ds} p_y &= \frac{d}{ds} \partial_y T = \frac{p_z}{g} \partial_y (f_c u) \\ \frac{d}{ds} z &= -\frac{f_c u}{g}; & \frac{d}{ds} p_z &= \frac{d}{ds} \partial_z T = 0 \\ \frac{d}{ds} Z &= \frac{d}{ds} T = 0. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Da die charakteristischen Kurven bereits mit den Isobaren identifiziert wurden, ist es nur eine Bestätigung, dass die barotrope Temperatur auf diesen konstant ist. Des Weiteren ist aber auch die vertikale Temperaturableitung auf Isobaren konstant. Dies entspricht wegen der angesetzten Parallelität der Isothermen und Isobaren und der damit einhergehenden Parallelität der Kurven konstanter Dichte und somit Konstanz des vertikalen Druckgradienten auf Isobaren auch der aus Literatur bekannten Aussage, dass die Dicke einer Luftschicht zwischen zwei Druckwerten global konstant ist (vgl. direkte Kopplung von thermischem Wind und Schichtdickegradient in Etling (2008) Gl. 10.11).

In dieser vereinfachten Situation kann nun die Isobare als Verbindungslinie zwischen gefragter Position (y, z) und Referenzpunkt (y_0, z_0) direkt ausgerechnet werden,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} z &= \frac{d}{ds} z = -\frac{f_c u}{g} \\ \Leftrightarrow dz &= -\frac{f_c u}{g} dy \Rightarrow z - z_0 = -\frac{1}{g} \int_{y_0}^y f_c u dy'. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Mit der bekannten linearen Struktur von f_c und analytisch integrierbarem $u(y)$ mit definierter erster und zweiter Stammfunktion $\hat{u}(u)$ und $\hat{\hat{u}}(y)$ entsprechend den Profilen in Tab. A.2 ist durch Produktintegration die Startkoordinate z_0 direkt bestimmbar,

$$z_0(y, z) = z + \frac{1}{g} \left[\left(\hat{u}(y) f_c(y) - \beta \hat{\hat{u}}(y) \right) - \left(\hat{u}(y_0) f_c(y) - \beta \hat{\hat{u}}(y_0) \right) \right]. \quad (4.39)$$

Die Umstellung nach z und Vorgabe der Startkoordinaten liefert eine analytische Formel für den Verlauf der Isobaren im z -System. Wichtig ist für die Definition des barotropen Zustandes die Verknüpfung einer beliebigen Position mit einem Referenzpunkt (y_0, z_0) zur Bestimmung von Randwerten. Diese Randwerte können weiterhin aus einer ruhenden hydrostatischen Atmosphäre berechnet werden. Der atmosphärische Zustand im gesamten Modellgebiet ist durch

$$\begin{aligned} p(y, z) &= p(y_0, z_0(y, z)) \\ T(y, z) &= T(y_0, z_0(y, z)) \\ \partial_z T(y, z) &= \partial_z T(y_0, z_0(y, z)) \end{aligned} \quad (4.40)$$

festgelegt. Druck- und Temperaturgradienten sind mittels Gl. 4.9 und Gl. 4.36 ebenfalls direkt analytisch gegeben.

Zur Vergleichbarkeit mit dem numerisch gelösten barotropen Feld ($\partial_z u = 0$) nach Abs. 4.4.1 wird dabei y_0 ebenfalls auf die Mitte des Kanals gesetzt. Es ist hier offensichtlich, dass für Randwerte einer isothermen Säule die gesamte Atmosphäre isotherm wird, wie direkt aus Gl. 4.36 gefolgert. Jegliche Schichtung der Randwerte setzt sich entlang der durch die geostrophische Balance bestimmten Isobaren fort. Die Schichtdicken bleiben erhalten, lediglich gleichförmige vertikale Verschiebungen der Gesamtstruktur erfolgen durch die Präsenz des geostrophischen Windes.

4.6. Charakterisierung der Baroklinität

Die Barotropiebedingung Gl. 4.35 bietet die Möglichkeit, eine Maßzahl für die Baroklinität, also die Abweichung von der Bedingung, zu definieren. Dies ist der Betrag des Vektorproduktes

$$\nabla p \times \nabla T \quad (4.41)$$

von Druck- und Temperaturgradient. Ein räumlicher Mittelwert dieser Größe gibt einen Eindruck davon, wie stark die Druck- und Temperaturflächen im Mittel zueinander geneigt sind.

Diese Diagnostik steht im direkten Zusammenhang mit dem allgemeinen geostrophischen Wind, bestehend aus Komponenten u_g und v_g , wie er auch bei Simulationen mit anfänglich rein zonalem Wind als mögliche Näherung eines späteren Gleichgewichtes zu betrachten ist. Der Druckgradient aus Gl. 4.19 vereinfacht sich nicht und der Ansatz von Gl. 4.20 führt, wie auch die Differentiation des für einen beliebigen Zustand definierten geostrophischen Windes⁵

$$\vec{u}_g = \frac{1}{\rho f_c} \left(\vec{k} \times \nabla p \right) \quad (4.42)$$

nach z unter der Annahme des hydrostatischen Gleichgewichtes, zur allgemeinen thermischen Windgleichung (Etling, 2008, Gl. 10.3)

$$\partial_z \vec{u}_g = \begin{pmatrix} \frac{u_g}{T} \partial_z T - \frac{g}{f_c T} \partial_y T \\ \frac{v_g}{T} \partial_z T + \frac{g}{f_c T} \partial_x T \end{pmatrix} = \frac{\vec{u}_g}{T} \partial_z T + \frac{g}{f_c T} \left(\vec{k} \times \nabla T \right). \quad (4.43)$$

⁵ als eine Komponente des Gesamtwindes, der auch ageostrophische Anteile aufweist

Mit $\vec{u}_g \cdot \nabla T = 0$ (keine Temperaturadvektion durch geostrophischen Wind) ist der vertikale Gradient des geostrophischen Windes in Gl. 4.41 wiederzufinden,

$$\nabla p \times \nabla T = \frac{p}{RT} \begin{pmatrix} -f_c u_g \partial_z T + g \partial_y T \\ -f_c v_g \partial_z T - g \partial_x T \\ f_c (v_g \partial_y T + u_g \partial_x T) \end{pmatrix} = -\frac{p f_c}{R} \partial_z \vec{u}_g. \quad (4.44)$$

Der Betrag des Kreuzproduktes ist mit dem Betrag des vertikalen Gradienten des geostrophischen Windes positiv verknüpft, wenn auch klar mit dem Druck gewichtet, was Windgradienten in niedrigeren Atmosphärenschichten hervorhebt. Als Maßzahl für Baroklinität, insbesondere zur Beurteilung dieser aus einem gegebenen Anfangszustand, sollte das Mittel des Betrages von Gl. 4.41 somit hinreichend und die explizite Berechnung eines zum Druckfeld passenden Gleichgewichtswindes zur Angabe des thermischen Windes vermeidbar sein. Der Vergleich mit tatsächlicher vertikaler Windscherung (außerhalb des geostrophischen Gleichgewichtes) kann Hinweise darauf geben, wie nahe das System dem geostrophischen Gleichgewicht ist.

4.7. Geostrophischer Zustand für Flachwassergleichungen

Für das Flachwassermodell als Vereinfachung der Euler-Gleichungen ist Hydrostatik per Definition gegeben: Eine horizontal konstante Höhe h beschreibt das Gleichgewicht ohne Wirken der Corioliskraft. Ein geostrophischer Grundstrom muss jedoch weiterhin separat formuliert werden. Der Ansatz besteht aus einer zonal konstanten Wasserhöhe $h(y)$, welche die Balance mit dem zonalen Grundstrom $u(y)$ hält. Die Anforderungen an das Windfeld selbst sind völlig analog zu den Betrachtungen im Euler-System (man ersetze ρ durch h). Es bleibt bei den bereits aufgestellten zonalen Windfeldern, jedoch mangels Vertikalkoordinate reduziert auf einen Verlauf in der Breite, $u(y)$.

Wie schon beim Euler-System verschwindet der nichtlineare Advektionsterm durch die Bedingung der Beschleunigungsfreiheit, während die geostrophische Balance in analoger Form aus einem Windprofil ein passendes Höhenfeld bestimmt. Die Betrachtung startet mit

$$\nabla \frac{1}{2} g h^2 = g h \nabla h = -f_c h u \quad (4.45)$$

$$\stackrel{h \neq 0}{\Leftrightarrow} g \nabla h = -f_c u. \quad (4.46)$$

Dies lässt sich für h als alleinige Funktion von y direkt integrieren,

$$dh = -\frac{1}{g} f_c u dy \Rightarrow h(y) = h_0 - \frac{1}{g} \int_{y_0}^y f_c(y') u(y') dy'. \quad (4.47)$$

Das Integral ist für entsprechende Windprofile analytisch lösbar, wie bereits in Gl. 4.39 belegt. Die Wahl von y_0 ist hier weniger kritisch als zuvor: Sie bestimmt nur eine Basishöhe h_0 bei der gewählten Koordinate mit der Bedingung, dass h über das gesamte Modellgebiet hinreichend von null entfernt ist.

Ein um die Kanalmitte lokalisierter Grundstrom $u(y)$ ist mit der das Gleichgewicht haltenden Höhe $h(y)$ in Abb. 4.2 dargestellt. Eine ähnliche Konfiguration wird folgend zur Simulation barotroper Instabilität eingesetzt (Abs. 6.4).

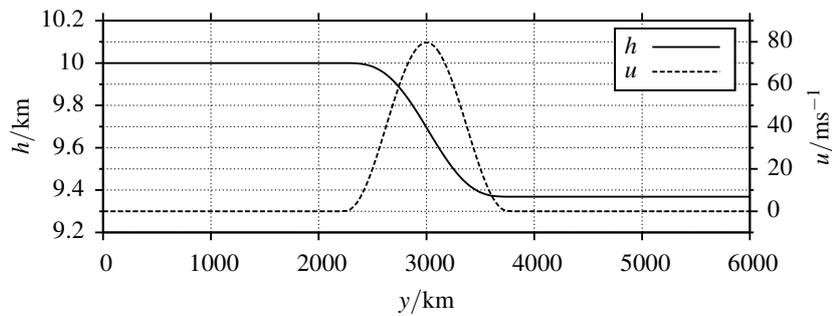


Abbildung 4.2.: Geostrophischer Zustand für Flachwassergleichungen im Kanal, zonaler Grundstrom $u(y)$ und die damit im Gleichgewicht stehende Wasserhöhe $h(y)$

5. Numerische Stabilität von Gleichgewichtszuständen und Erhaltungseigenschaften

Eine grundlegende Anforderung an die Stabilität des in Kap. 3 entwickelten Verfahrens ist das Halten von Gleichgewichtszuständen. Einem analytischen stabilen Gleichgewicht entsprechend initialisierte Anfangszustände sollten in der numerischen Lösung der atmosphärischen Gleichungen (Gl. 2.30 bzw. Gl. 2.39) auch nahe diesem Anfangszustand bleiben. Es zeigt sich, dass dieses Kriterium vom unveränderten Verfahren nach Kap. 3 nicht erfüllt ist. Es sind Anpassungen nötig, die in Abs. 5.1 motiviert und beschrieben werden. Diese sind durch Simulationen mit dem für weitere Arbeiten genutzten Polynomgrad $k = 1$ und zusätzlich durch solche mit $k = 2$ belegt.

Nach Stabilisierung des Verfahrens dient Abs. 5.2 einer empirischen Bestätigung der von Cockburn (1998) angeführten Konvergenzordnung von $k + 1$ bei $k = 1$ mit expliziter (in 2D) und semi-impliziter Zeitintegration (in 3D).

Den Abschluss bildet Abs. 5.3 mit einer Betrachtung der Langzeitstabilität und von Erhaltungseigenschaften für die konservierten Variablen in den Euler-Gleichungen sowie abgeleitete Energien. Dies ist eine Grundlage, um im folgenden Kap. 6 Testfälle atmosphärischer Dynamik reproduzieren zu können.

Es ist für die Stabilitätsbetrachtungen wichtig, ein Gleichungssystem ohne Referenzzustand (Gl. 2.30) bzw. eines mit einem sich vom angesetzten Gleichgewichtszustand unterscheidenden Referenzzustand zu verwenden. Der Ansatz des Gleichgewichtes im Referenzzustand nimmt die Stabilität dessen vorweg. Auch wenn das Verfahren in Bezug auf die Kräftegleichgewichte instabil ist, kann die Beschränkung auf die Behandlung von Abweichungen von einer Referenz (Gl. 2.39) erfolgreiche Simulationen hervorbringen, während signifikante Dynamik jenseits des Referenzzustandes die numerische Intabilität ausbrechen lässt.¹

¹ Erfahrungen in der Modellentwicklung für die vorliegende Arbeit haben das belegt. Einfache Simulationen auf begrenzter Zeitskala waren erfolgreich, aber vor allem der Übergang zu 3D zeigte durch starke unphysikalische Instabilitäten auch mit hydrostatischem Referenzzustand die Notwendigkeit der Stabilisierung des Verfahrens.

5.1. Polynomiale Balancierung des DG-Verfahrens

Die Balancierung des Verfahrens zur Stabilisierung von analytischen Gleichgewichtszuständen beginnt mit der Betrachtung des dominanten Gleichgewichtes mit der Erdanziehungskraft (Gl. 4.1) im eindimensionalen Modell. Folgend wird dies mit der horizontal wirkenden Corioliskraft auf 3D erweitert.

Die volle Balancierung besteht in der Behandlung der diskretisierten Terme von Gl. 2.12 durch

- selektive Projektion der Quellterme \vec{r} zur Reduktion des Polynomgrades, wo es für Gleichgewichte mit Termen aus der Flussdivergenz $\overleftrightarrow{\nabla} \underline{f}$ notwendig ist und
- Projektion der in \vec{q} nichtlinearen Flussfunktion \underline{f} in den polynomialen Basisraum

bei der Auswertung der Tendenzen \vec{F} (Gl. 3.42).

Diese volle Balancierung wird durch vier Entwicklungsstufen motiviert,

1. Ausgangssituation ohne Balancierung („low0bal0“),
2. isotrope Reduktion des Polynomgrades von \vec{r} ohne Veränderung der Auswertung der Flussfunktion („low1bal0“),
3. isotrope Polynomgradreduktion von \vec{r} und dazu Projektion von \underline{f} („low1bal1“) und zuletzt
4. volle Balancierung mit selektiver Polynomgradreduktion und Projektion von \underline{f} („low2bal1“).

5.1.1. Ausgangssituation („low0bal0“)

Das inhomogene Gleichungssystem Gl. 2.12 erfordert zusätzlich zur numerischen Behandlung der Flussfunktion selbst die korrekte Darstellung des Zusammenwirkens von Fluss \underline{f} und Quelltermen \vec{r} . Im Fall der Euler-Gleichungen mit der Ursprungsform in Gl. 2.30 betrifft dies lediglich die Impulsgleichungen mit hydrostatischem bzw. geostrophischem Gleichgewicht. Die Behandlung von Gleichgewichten zwischen Kräften aus der Flussfunktion (Druckgradientenkraft) und denen aus den Quelltermen (Erdanziehungskraft und Corioliskraft) verdient genauere Betrachtung. Die mathematische Behandlung des DG-Verfahrens in Cockburn (1998) beschränkt sich auf homogene Probleme der Form von Gl. 2.9, also ohne Quellterme. Es muss gezeigt werden, dass das Verfahren auf das allgemeine Problem Gl. 2.12 anwendbar ist.

Anwendungen mit hohen Polynomgraden und unexakter Integration (z.B. $k = 10$ durch Giraldo und Restelli (2008)) existieren und haben die prinzipielle Eignung von DG für die Flachwasser- und Euler-Gleichungen gezeigt. Der Fokus der vorliegenden Arbeit liegt auf dem Verhalten des in Kap. 3 beschriebenen Verfahrens auch mit niedrigen Polynomgraden, speziell $k = 1$ als die nächste Stufe über finiten Volumen mit $k = 0$. Es ist eine Frage, ob ein DG-Verfahren in dieser Konfiguration für atmosphärische Anwendungen geeignet ist oder nicht. Tatsächlich existieren mit der unmodifizierte Methode schon Schwierigkeiten, das hydrostatische Gleichgewicht zu halten. Ein Experiment in einer Dimension verdeutlicht dies:

Das volle Gleichungssystem Gl. 2.30 ohne Referenzzustand wird in einer Säule von 20 km Höhe (Konfiguration in Tab. 5.1 umrissen) mit einem analytischen hydrostatischen

Zustand (stabiles Gleichgewicht, aus Abs. B.2) initialisiert und für eine Stunde integriert.² Gegenstand der Betrachtung ist ein Maß für die Abweichung vom diskretisierten Anfangszustand. Ein stabiles Modell sollte nahe beim Anfangszustand bleiben bzw. zu einem numerischen Gleichgewicht in der Umgebung streben. Ein klares Zeichen für numerische Instabilität ist exponentielles Wachstum der Abweichung.

Den Anfang bildet eine isotherm initialisierte Säule mit $T = 273.15$ K. Ohne stabilisierende Maßnahmen ist das Problem sowohl mit $k = 1$ als auch $k = 2$ erst ab gewisser Auflösung eine Stunde lang integrierbar. Die in Abb. 5.1 dargestellte relative Abweichung in der Masseverteilung, die \mathcal{L}^2 -Norm (Abs. A.2) der Differenz zum Anfangszustand in Relation zur \mathcal{L}^2 -Norm desselben, steigt für geringe Auflösungen erkennbar exponentiell mit der Laufzeit (bis hin zum Simulationsabbruch). Auch höhere Auflösungen teilen den exponentiellen Anstieg, wenn auch von niedrigerem Niveau aus. Dies bezeugt für $k = 1$ und $k = 2$ instabiles Verhalten des unmodifizierten DG-Verfahrens aus Kap. 3.

Ein Blick auf den Vertikalwind, siehe Abb. 5.2 zeigt ein typisches Bild für DG-Diskretisierung mit niedrigem Polynomgrad im Ungleichgewicht: Es stehen gleich gerichtete lokale Gradienten in den Elementen mit Sprüngen an Elementgrenzen derart in Zusammenhang, dass mit $k = 1$ das Bild einer Sägezahnkurve gezeichnet wird. Mit Polynomen vom Grad $k = 2$ mit drei Stützpunkten ist es hier möglich, Unstetigkeiten an den Elementgrenzen weitgehend zu vermeiden. Dennoch wird eine sägezahnartige Struktur mit auftretenden Vertikalwinden erzeugt, wenn auch mit deutlich verringertem Betrag. In diesem deutet sich an, dass mit steigendem Polynomgrad die Stärke der numerischen Störung abnimmt. Jedoch geht aus Abb. 5.1 hervor, dass auch von dem niedrigeren Niveau aus ein vergleichbares exponentielles Wachstum der Differenz zum Anfangszustand auftritt. Im Wesen ist für beide dargestellten Polynomgrade die Instabilität präsent.

Es ist eine wichtige Eigenschaft von DG, dass Unstetigkeiten, z.B. von Schockwellen, dargestellt werden können, aber es ist auch unabhängig von resultierender Instabilität nicht wünschenswert, wenn diese für einen analytisch glatten und im Gleichgewicht stehenden Anfangszustand als Lösung generiert werden.

Slope Limiter

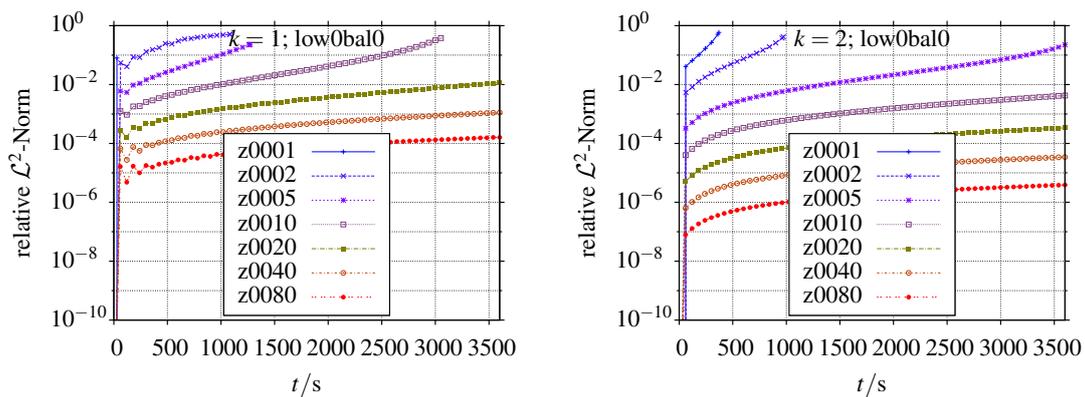
Ein bekanntes Verfahren, um Instabilitäten von DG-Verfahren zu filtern, sind „Slope Limiter“ (nach Leer (1977) bzw. Leer (1979), auch Cockburn (1998), Burbeau et al. (2001) und Zhang und Shu (2011)). Diese greifen ein, um gezielt die Unstetigkeiten an Elementgrenzen bzw. den Gradienten („Slope“) der Lösung in einem Element zu begrenzen, mit dem Ziel, numerische Oszillationen, z.B. in der Gegenwart von Schocks zu unterbinden. Ein Slope Limiter stellt somit eine Art zwischengeschalteten Filter zur Glättung des diskretisierten Zustandes dar.

Ein Filter wie von Leer (1977, Gl. 66 bzw. Abb. 6) eingeführt würde in der Tat die Unstetigkeiten mit $k = 1$ in Abb. 5.2 beseitigen, stellt aber einen starken Eingriff in das Verfahren dar. Es ist wünschenswert, dass das zugrunde liegende DG-Verfahren zumindest für die Einhaltung grundlegender Gleichgewichte solcher Eingriffe nicht bedarf. Folgend wird das in Kap. 3 eingeführte Verfahren in sich so weiter entwickelt, dass ein Filter für diese Gleichgewichte nicht notwendig ist. Als zusätzliche Maßnahme zur Anwendung in Nichtgleichgewichtssimulationen, die starke Gradienten und damit potentiell numerische Oszillationen bei diesen erzeugen, kann die Einführung von Slope Limitern erwogen werden.

² Diese kurze Zeitskala dient der Betrachtung der schnellen nichthydrostatischen Effekte der unweigerlichen Störung des hydrostatischen Grundzustandes in der Diskretisierung.

| Eigenschaft | Wert (Erläuterung) |
|--------------------|---|
| Dimensionen | 1D (z) |
| Elemente | variabel |
| Basisgrad k | 1 oder 2 |
| Ausdehnung (z) | 20 km |
| Randbedingungen | reflektiv (Abs. 3.3.2) |
| Basiszustand | hydrostatisch (siehe Abs. B.2), isotherm mit $T = 273.15$ K, polytrop mit $\partial_z T = -2$ K/km, mehrschichtig mit 7 polytropen Schichten (Temperaturänderungsraten wie US-Standardatmosphäre nach COESA, 1976, 90 km auf 20 km gestaucht) |
| Referenzzustand | keiner |
| Störung | keine, nur numerischer Fehler durch Rechnung ohne Referenzfeld |
| Zeitschritt | explizit, variabel gemäß Kriterium Gl. 3.50 |
| Simulationsdauer | 1 h, Langzeit bis 1000 d |

Tabelle 5.1.: Konfiguration zum hydrostatischen Gleichgewicht

Abbildung 5.1.: Hydrostatisches Gleichgewicht ohne Balancierung („low0bal0“): Differenznorm der Masseverteilung als Zeitreihe für verschiedene Auflösungen ((Elementzahl in z von 1 bis 80)), links $k = 1$, rechts $k = 2$

Verschiedene Polynomgrade in der Diskretisierung

Eine mögliche Ursache für dieses offensichtliche Ungleichgewicht bezogen auf die Erdanziehungskraft ist in der diskretisierten Form aus Gl. 3.22 zu finden. Wird ein stationärer Zustand im Element E im Einklang mit der Umgebung angesetzt, so fällt das Randintegral mit dem numerischen Fluss heraus — es muss im Gleichgewicht verschwinden bzw. sich durch Teilflüsse durch verschiedene Grenzflächen des Elementes aufheben, da ein Netto-Fluss durch den Elementrand globales Ungleichgewicht bedeutet. Somit ist die Problematik hier komplementär zu den Stabilitätsuntersuchungen von Kirby und Karniadakis (2005). Dort ist der numerische Fluss und Korrekturen dessen zur Stabilisierung von diffusiven Systemen Arbeitsgegenstand, hier ist es das Wirken von Kräften in der Volumendiskretisierung. Es stehen sich die Volumenintegrale von Flussfunktion und Quelltermen gegenüber, mit minimalen Polynomgraden der Integranden wie in Gl. 3.38 bestimmt,

$$\partial_t \bar{\vartheta} = 0 \quad \forall E \in \Omega \Rightarrow \int_E \underbrace{\left[\overline{M}^{-1} \overline{\nabla} \bar{\varphi} \right]}_{\in P^{2k-1}} \vec{f}_\vartheta \, d^n x = - \int_E \underbrace{r_\vartheta \left[\overline{M}^{-1} \bar{\varphi} \right]}_{\in P^{2k}} \, d^n x. \quad (5.1)$$

Die Polynomgrade werden zur Vereinfachung nicht im mehrdimensionalen Raum nach Koordinatenrichtungen getrennt. Eine mögliche Unterscheidung der Basisgrade in verschiedene Richtungen berührt die folgende Argumentation nicht.

Über die Volumenintegration müssen sich also in diesem vereinfachten Bild (Vernachlässigung von Nichtlinearitäten der Flussfunktion) ein Polynom vom Grad $2k$ und eines vom Grad $(2k - 1)$ gegenseitig nachbilden. Während dies im Integral sicherlich möglich ist, erzwingt es aufgrund der verschiedenen Funktionenräume suboptimale Lösungen mit ungewollten Unstetigkeiten. Auch sollte für einen idealen analytischen Gleichgewichtszustand das Gleichgewicht zwischen den beiden Seiten sogar punktweise gelten. Das dies im Allgemeinen für Polynome unterschiedlichen Grades nicht möglich ist, ist offensichtlich. Wenn auch das Gleichgewicht im bestimmten Integral über ein Element erreichbar ist, so ist schnell klar, dass die dies realisierenden Integranden im Allgemeinen nicht punktweise übereinstimmen können, womit insbesondere Sprünge der Darstellungen an den Elementrändern nicht ausgeschlossen sind, ja deren Existenz für das Gleichgewicht in Begriffen der betrachteten Integrale geradezu eine Vorbedingung darstellt.

5.1.2. Isotrope Reduktion des Polynomgrades der Quellterme („low1bal0“)

Ein Ansatz, die Situation zu egalisieren, ist die kontrollierte Abbildung der Quellterme aus dem Raum mit $2k$ — tatsächlich sind die Quellterme der Euler-Gleichungen unter Vernachlässigung der auf größerer Skale relevanten Variation von f_c linear in den Systemvariablen — in den mit $2k - 1$ vor der Integration. Dies geschieht über eine \mathcal{L}^2 -Projektion von \vec{r} in den Polynomraum P^{k-1} . Dazu bedarf es einer zusätzlich zur normalen Basis (φ_i) definierten Basis (ψ_j) niedrigerer Ordnung. Einer in P^k definierten Größe $\vartheta(x)$ mit Koeffizientenvektor $\bar{\vartheta}$ (Gl. 3.8 für eine Dimension zu festem Zeitpunkt) wird die Projektion ϑ' in P^{k-1} mit Koeffizienten $\bar{\vartheta}'$,

$$\vartheta' = \bar{\vartheta}' \cdot \vec{\psi}, \quad (5.2)$$

zugeordnet. Die Projektion ist darüber definiert, dass das Produktintegral von ϑ und einer Funktion aus P^{k-1} gleich dem dieser mit ϑ' ist,

$$\forall \psi_m \in P^{k-1} : \int_E \vartheta' \psi_m d^n x = \int_E \vartheta \psi_m d^n x \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_{j=1}^k \vartheta'_j \int_E \psi_j \psi_m d^n x &= \sum_{i=1}^{k+1} \vartheta_i \int_E \varphi_i \psi_m d^n x \\ &\Leftrightarrow \bar{\vartheta}' \underline{M}_{k-1} = \bar{\vartheta} \underline{C} \\ &\Rightarrow \bar{\vartheta}' = \bar{\vartheta} \underline{C} \underline{M}_{k-1}^{-1} \end{aligned} \quad (5.4)$$

mit der aus der Faltung der verschiedenen Basen bestimmten Projektionsmatrix \underline{C} .

Dies bedingt eine eindeutige Zuordnung eines Polynoms in dem gewählten Raum. Eine effiziente Umsetzung im Gesamtkontext kombiniert diese Projektion mit der Auswertung an Quadraturpunkten zu einer Matrixoperation, so dass kaum Mehraufwand benötigt wird. Ist die abzubildende Größe ϑ noch nicht im Basisraum mit Grad k dargestellt, so wird sie über Gl. 3.41 abgebildet. Dies wurde für die in die rechte Seite eingehenden Komponenten von \vec{q} umgesetzt. Dabei ist eine Voraussetzung, dass die rechte Seite \vec{r} eine lineare Funktion der Systemvariablen ist.³

Das Resultat zeigt Verbesserungen in den Zeitreihen der Differenz zum Anfangszustand in Abb. 5.3. Die Anstiege der Differenznormen sind im Vergleich zu Abb. 5.1 nicht mehr so stark. Allerdings sind sie noch immer präsent. Ein auffallender Unterschied zwischen $k = 1$ und $k = 2$ ist die nun mit $k = 1$ als dominante Struktur sichtbare Störungswelle, die sich in der Abweichungszeitreihe und auch in der Ansicht des Vertikalwindes nach einer Stunde in Abb. 5.4 (blaue Linien mit Sägezahnmuster) zeigt. Eine solche Welle, resultierend aus dem als Störung interpretierbaren auflösungsabhängigen Unterschied zwischen dem nach Abs. 3.1.6 diskretisierten analytischen Zustand und einem numerischen Gleichgewicht, ist auch in einem stabilen Modell zu erwarten. Mit reflektiven Randbedingungen bleibt diese Welle im System, wenn sie nicht durch interne Dissipation abgebaut wird. Insgesamt ist bei $k = 2$ der Effekt der Glättung deutlich subtiler sowohl in der Zeitreihe (Abb. 5.3) als auch im Bild des Vertikalwindes (Abb. 5.4).

5.1.3. Isotrope Polynomgradreduktion von Quelltermen sowie Projektion der Flussfunktion („low1bal1“)

Die noch immer vorhandene klare Instabilität bezeugt, dass weitere Maßnahmen zur Stabilisierung erforderlich sind. Die vorgenommene Glättung der Quellterme bzw. Kräfte hat eines der beiden Integrale aus Gl. 5.1 in eine polynomiale Darstellung gebracht, das andere ist nur für lineare Flussfunktionen tatsächlich ein Polynom. Der logische Schritt ist nun eine Näherung der Komponenten von \underline{f} in dem Polynomraum vom Grad k . Dabei ist eine Aufspaltung der Flussfunktion

$$\underline{f} = \underline{f}_{\text{alone}} + \underline{f}_{\text{balance}}, \quad (5.5)$$

für Euler-Gleichungen (Gl. 2.30)

$$\underline{f}_{\text{alone}} = \begin{pmatrix} \vec{U}^T \\ \ominus \vec{U}^T \\ \frac{1}{\rho} \vec{U} \otimes \vec{U} \end{pmatrix}; \quad \underline{f}_{\text{balance}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho \underline{\text{Id}} \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

³ Die folgend beschriebene volle Balancierung führt dennoch die Projektion nach Auswertung der rechten Seite an Basispunkten aus, was Nichtlinearitäten bereits glättet.

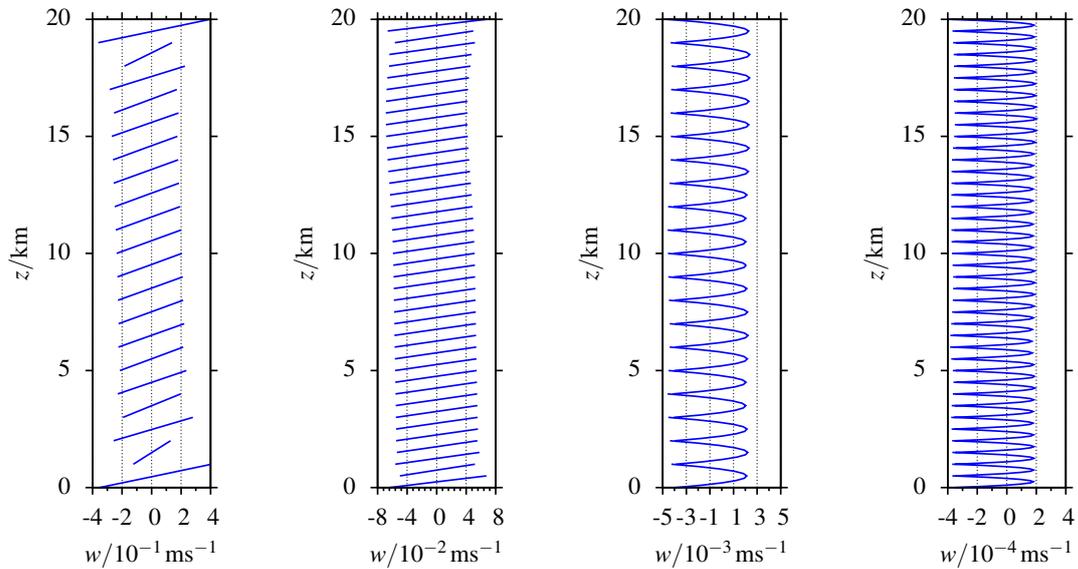


Abbildung 5.2.: Hydrostatisches Gleichgewicht ohne Balancierung: Ansicht des Vertikalwindes nach einer Stunde, mit $k = 1$ (links) und $k = 2$ (rechts) sowie jeweils 20 und 40 Elementen

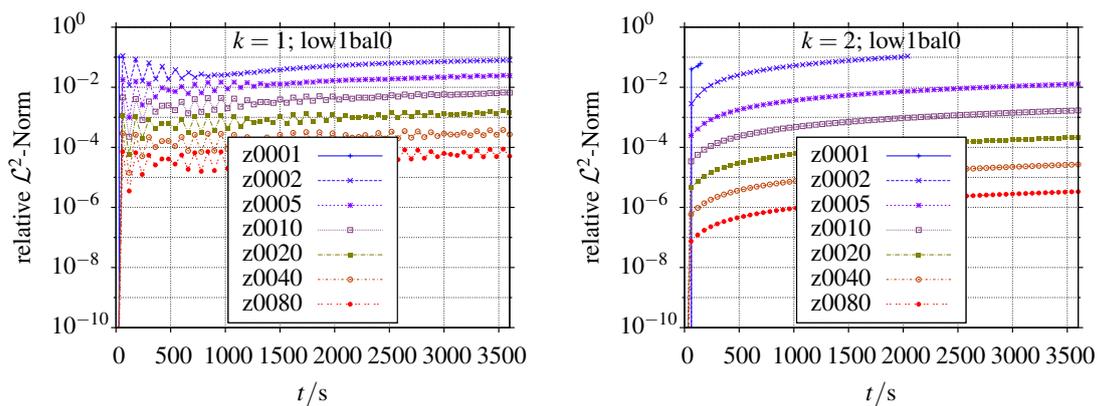


Abbildung 5.3.: Hydrostatisches Gleichgewicht mit isotroper Quellterm-Projektion („low1bal0“): Differenznorm der Masseverteilung als Zeitreihe für verschiedene Auflösungen (Elementzahl in z von 1 bis 80), links $k = 1$, rechts $k = 2$

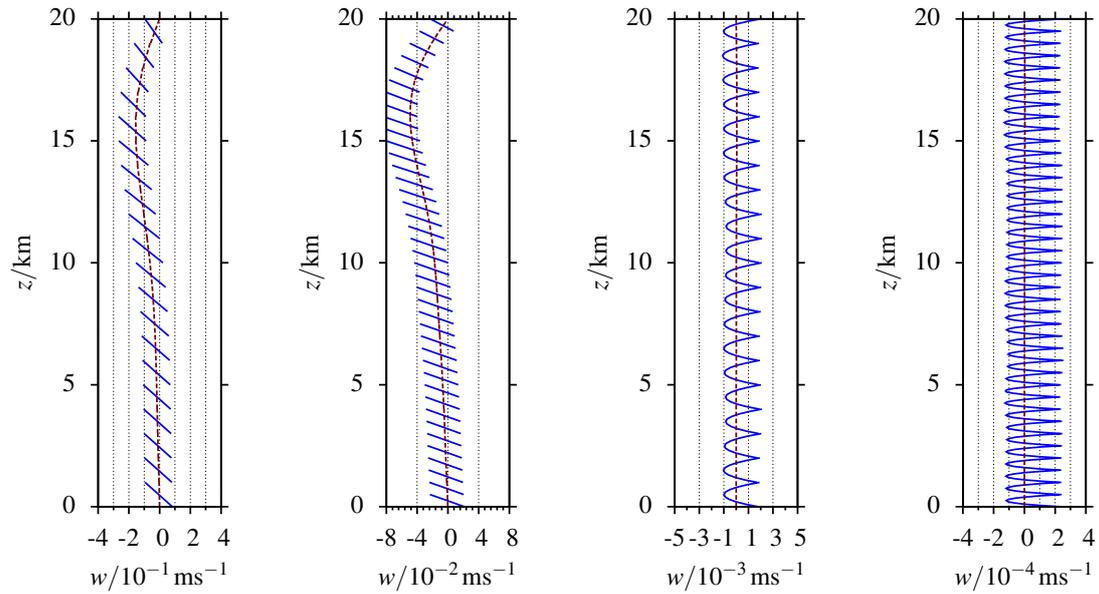


Abbildung 5.4.: Hydrostatisches Gleichgewicht mit isotroper Quellterm-Projektion, Ansicht des Vertikalwindes nach einer Stunde, mit $k = 1$ (links) und $k = 2$ (rechts) sowie jeweils 20 und 40 Elemente, blaue Linien mit starken lokalen Gradienten ohne zusätzliche Projektion der Flussfunktion („low1ball“), dunkelrote Linien mit („low1ball“)

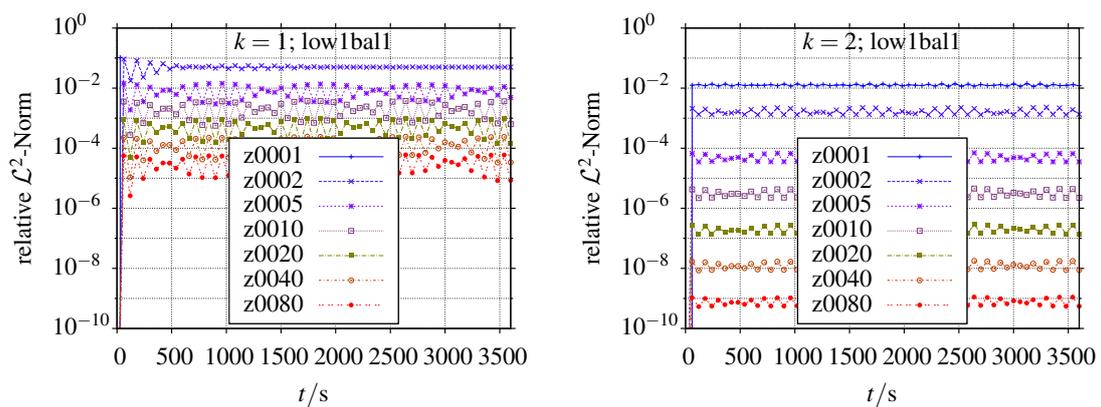


Abbildung 5.5.: Hydrostatisches Gleichgewicht mit isotroper Projektion von Quelltermen sowie Projektion der Flussfunktion („low1ball“), Differenznorm der Masseverteilung als Zeitreihe für verschiedene Auflösungen (Elementzahl in z von 1 bis 80), links $k = 1$, rechts $k = 2$

in eine alleinstehende („alone“) und eine in Balance mit einem Quellterm auf der rechten Seite stehende („balance“) Komponente angebracht. Da auf den Fluss im DG-Verfahren nur lineare Operatoren wirken, ist eine solche Aufspaltung problemlos zulässig, wie auch schon die Hinzunahme vom Diffusionsfluss zuvor (Abs. 3.4). Bei den Euler-Gleichungen ist die Druckgradientenkraft für die bestimmenden Gleichgewichte bedeutsam und wird vor Auswertung des Volumenintegrals in den Raum der Basispolynome abgebildet.

Diese Abbildung wird analog zur Initialisierung der Anfangswerte aus analytischen Feldern durchgeführt, durch Auswertung an den Lagrangepunkten (siehe Abs. 3.1.6). Zur Konsistenz des Gesamtverfahrens wird der Randfluss \hat{f} mit der gesamten Flussfunktion nach der Glättung ausgewertet. Tatsächlich ist es nur ein wenig bedeutsames Detail, ob stattdessen der unveränderte ursprüngliche Randfluss eine nachträgliche Überführung in den Basisraum auf der Grenzfläche erfährt. Ebenso ist es praktisch für die Stabilität nicht relevant, ob die Flussfunktion nach Gl. 5.5 aufgespalten wird oder nicht. Es gibt allerdings ohne Aufspaltung eine gewisse Beeinflussung der nichtlinearen Dynamik durch die Projektion, die ohne Stabilitätsargument einer Begründung bedürfe, fern der Frage, ob sie nun für sich signifikant ist.

Mit der Einführung der Auswertung des Flusses im polynomialen Basisraum liegt es nahe, auch wahrscheinlich vernachlässigbare Nichtlinearität auf Seite der Quellen \vec{r} (räumliche Variation von f_c) mit demselben Verfahren zu eliminieren. Fortan wird auf beiden Seiten im Basisraum ausgewertet, auf der rechten Seite folgt dann zusätzlich die \mathcal{L}^2 -Projektion von \vec{r} zur Anpassung des Polynomgrades.

Mit der Behandlung beider Seiten von Gl. 5.1 mit einer kontrollierten Transformation in kompatible polynomiale Funktionsräume besteht nun auch mathematisch die Möglichkeit zum Ausgleich. Die Zeitreihen der Differenznorm der Masseverteilung in Abb. 5.5 (Darstellung analog zu Abb. 5.1 bzw. Abb. 5.3) bezeugen den Erfolg dieser Entwicklungsstufe: Es sind Oszillationen sichtbar, aber kein dauerhafter Anstieg. Dass die Abweichung im Mittel konstant von Null verschieden ist und sich mit steigender Auflösung verringert, entspricht der Suche eines numerischen Gleichgewichts, dass mit steigender Auflösung näher am diskretisierten analytischen Gleichgewicht liegt. Der Zusammenhang mit der Auflösung ist in Abb. 5.5 gut zu ersehen und wird in Abs. 5.2 noch konkretisiert.

Eine ebenfalls deutliche Auswirkung der Transformation auf beiden Seiten ist, neben einer weiteren Reduktion des maximalen Betrages, der Verlauf des Vertikalwindes, wie die ebenfalls in Abb. 5.4 eingebundenen Graphen mit Flussbalancierung im direkten Vergleich zeigen. Tatsächlich ist die Reduktion der maximalen Windbeträge durch Reduktion der Unstetigkeiten und der damit verbundenen Gradienten innerhalb der Elemente zu erklären.

Es ist, entsprechend dem nicht mit dem analytischen übereinstimmenden numerischen Gleichgewicht, unabdingbar, dass es hier eine Störungswelle gibt, die ohne starke Diffusion oder eine Absorptionsschicht längerfristig im System bleiben muss. Bemerkenswert ist aber, dass die stabilisierte Methode diese Welle im Vertikalwind nicht nur stetig, sondern auch nahezu differenzierbar gestaltet. Im Prozess der Reflexion der Welle am Oberrand treten mit $k = 1$ noch erahnbare Unstetigkeiten auf, aber im Volumen fern des Randes sind die Kurven glatt. Der direkte Vergleich der übereinander gelegten Kurven für „low1bal0“ und „low1bal0“ in Abb. 5.4 zeigt den lokalen Charakter der Wirkung der Flussprojektion deutlich. Bei $k = 2$ ist der relative Effekt in Bezug auf die lokalen Gradienten deutlich stärker. Zwar ist mit erhöhtem Polynomgrad die Störung insgesamt deutlich kleiner als mit $k = 1$, aber trotzdem zeigt die zusätzliche Flussbalancierung Wirkung.

Hydrostatisches Gleichgewicht verschiedener Schichtungen

Die Betrachtung der kurzfristigen Stabilität der hydrostatischen Säule — der Entwicklung der nichthydrostatischen Störungen — wird von Abb. 5.7 abgeschlossen. Dort sind für feine Auflösung und beide Basisgrade die Abweichungen für isotherme (wie bisher), polytrope und mehrschichtige Atmosphäre zusammengefasst (Darstellung der Temperaturverläufe in Abb. 5.6). Naturgemäß ist die Abweichung bei der mehrschichtigen Atmosphäre größer, aber es ändert sich nichts an den Stabilitätseigenschaften. Das gilt auch bei der geringen Auflösung mit fünf Elementen (Abb. 5.7(c) und Abb. 5.7(d)), deren numerische Differenz zum Anfangszustand im Vergleich zur Auflösung mit 80 Elementen (Abb. 5.7(a) und Abb. 5.7(b)) um mindestens zwei Größenordnungen größer ist, aber auf diesem Niveau stabil erscheint.

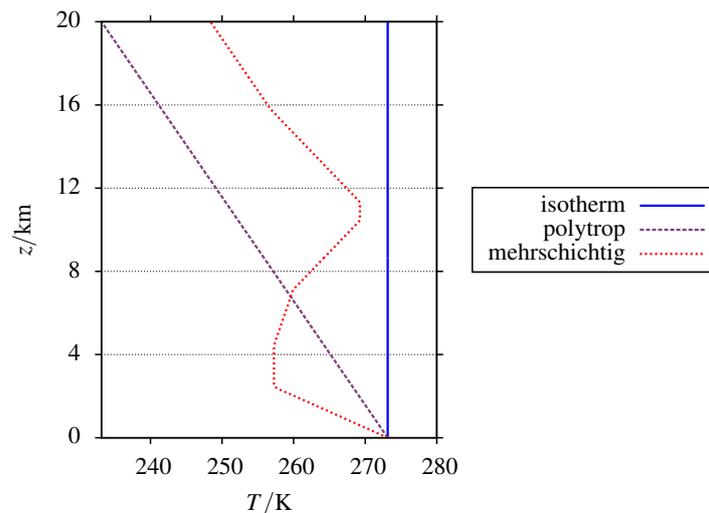


Abbildung 5.6.: Temperaturverläufe der hydrostatischen Säulen, die Gitterlinien in z als Andeutung der Elementgrenzen bei Auflösung mit fünf Elementen

Hydrostatisches Gleichgewicht über 1000 Tage

Die Konfiguration der mehrschichtigen Atmosphäre in geringer Auflösung (sieben Schichten, fünf Elemente mit $k = 1$) bewährt sich auch bei Integration über 1000 Tage, wie Abb. 5.8 mit Zeitreihen der Dichte- sowie des Impulsabweichung belegt. Nach anfänglichem Anstieg der Abweichung in Dichte und Impuls während der ersten Minute erreicht die Dichteverteilung nach ca. einer Viertelstunde ihr Gleichgewicht mit leichter Oszillation und ist nach einem Tag konstant. Der Impuls bleibt entsprechend fortwährend an den Rändern reflektierter Schallwellen etwas länger präsent. Nach einer Woche ist die Luftsäule praktisch in Ruhe.

Durch die Verwendung der \mathcal{L}^1 -Norm, welche die physikalischen Dimensionen nicht berührt, wird die Größenordnung der Abweichung der Dichteverteilung in Abb. 5.8 anschaulich: Das Integral der Volumendichte über die eine Raumdimension erzielt eine Flächendichte der Masse, die mit letztendlich unter 100 kg/m^2 in der Größenordnung von 10 hPa Differenz im Bodendruck — also einem Prozent — liegt, wenn man diese integrierte Abweichung in der Verteilung als Massenverlust bzw. -gewinn in der hydrostatischen Säule interpretierte. Dies ist zusammen mit den anfangs auftretenden Störungswinden um 1 m/s nicht wirklich vernachlässigbar, jedoch angesichts der geringen Auflösung mit fünf Schichten und der Initialisierung, die keine Rücksicht auf das numerische Gleichgewicht

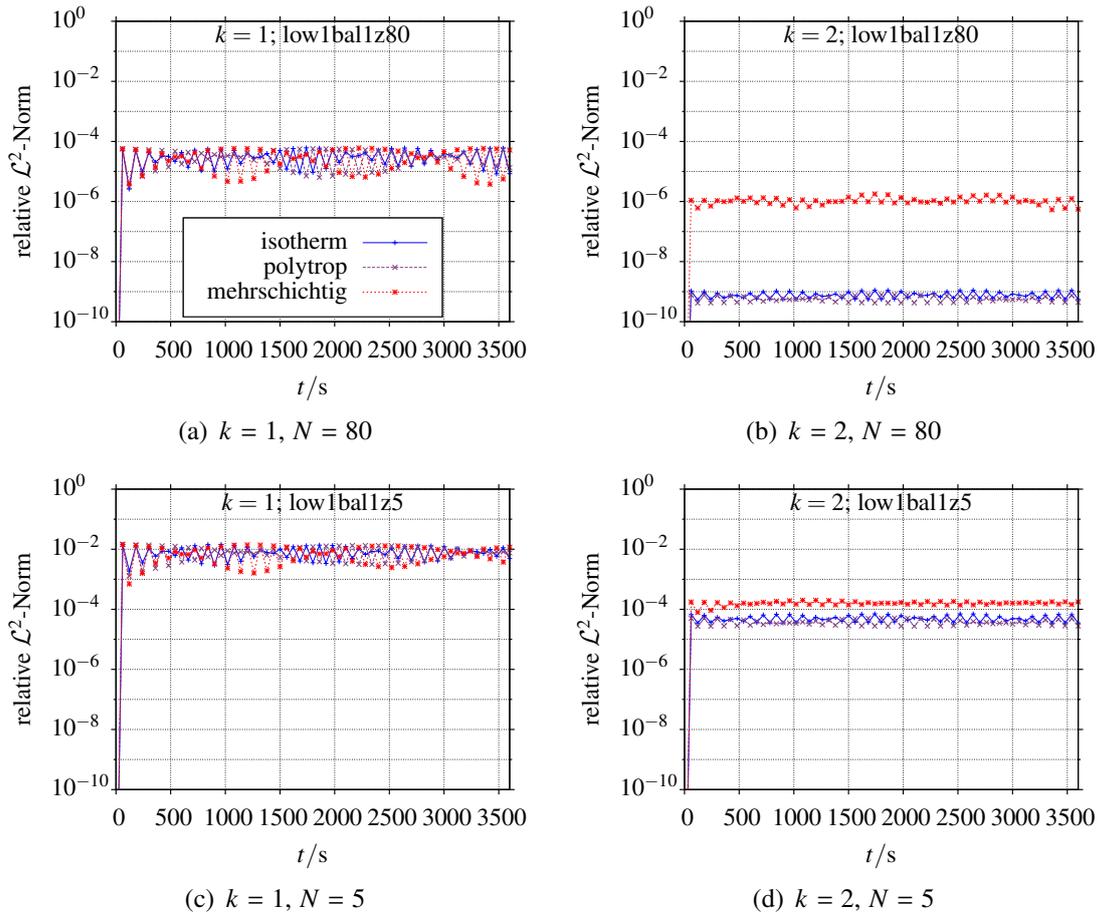


Abbildung 5.7.: Hydrostatisches Gleichgewicht für verschiedene Zustände mit isotroper Projektion der Quellterme und der Flussfunktion („low1bal1“), Differenznorm der Masseverteilung als Zeitreihe mit $k = 1$ und $k = 2$ sowie mit 80 Elementen oder derer 5

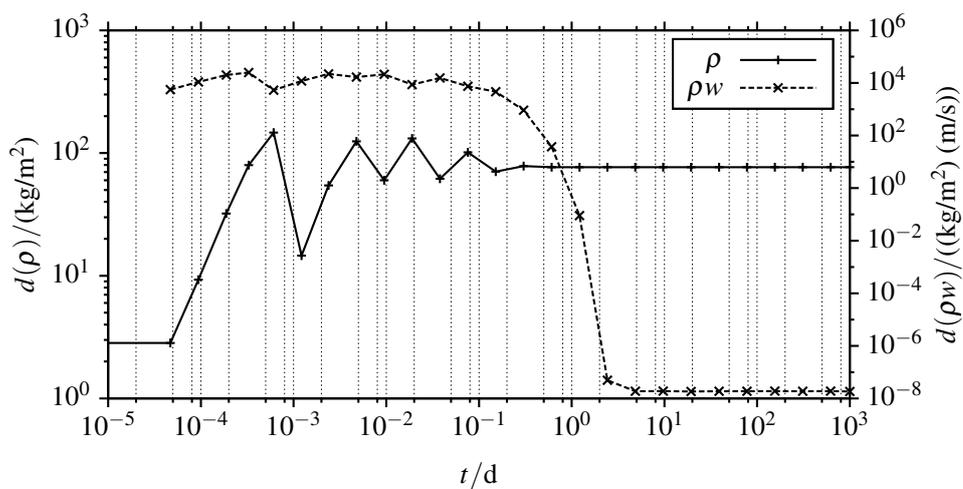


Abbildung 5.8.: Langzeitentwicklung der \mathcal{L}^1 -Norm der Dichte- und Impulsabweichung der gering aufgelösten (fünf Elemente) mehrschichtigen ruhenden Luftsäule mit isotroper Projektion der Quellterme und des Flusses („low1bal1“) mit $k = 1$

legt, positiv zu bewerten. Gleichwohl verdeutlicht es eine Motivation, für verwertbare Simulationen zur Vermeidung solch starker Ausgleichsbewegungen mit einem zumindest hydrostatisch ausgeglichenen Referenzzustand gemäß Gl. 2.39 anzusetzen.

5.1.4. Volle Balancierung mit selektiver Polynomgradreduktion und Projektion der Flussfunktion („low2bal1“)

Nach der Hydrostatik in der Vertikalen ist das nächste wichtige Gleichgewicht das des geostrophischen Windes in der Horizontalen, welches in einem vollen 3D-Modell zusammen mit dem hydrostatischen Gleichgewicht gehalten werden muss.

Als Beispielfigur dafür (Übersicht der Parameter in Tab. 5.2) dient ein barotroper Wind auf einfach-polytroper vertikaler Schichtung (siehe Abs. 4.5) mit 6.5 K/km Temperaturabnahme von Bodentemperatur 300 K in der Mitte eines in x periodischen und in y und z mit reflektiven Rändern versehenen Kanals von 1000 km im Quadrat und einer Höhe von weiterhin 20 km. Der zonale Wind hat in y ein Profil in Form einer Sinuskurve im Bereich $[0, \pi]$, von 0 m/s an den Rändern zu 30 m/s in der Kanalmitte (Abb. 5.9). Damit ist ein nichttrivialer Verlauf des Windes gegeben, ohne durch Präsenz von Wendepunkten barotrope Instabilität zu provozieren.⁴

Die Mitte des Kanals entspricht für die Berechnung der Corioliskraft, wie ohne weitere Angabe in dieser Arbeit implizit, einer Breite von 45 °N. Das Modell wird in der semi-impliziten Variante eingesetzt, was Nutzung eines balancierten Referenzfeldes bedingt, hier eine ruhende polytrope Atmosphäre mit $\partial_z T = -6.5$ K/km. Der Anfangszustand unterscheidet sich davon durch den hinzugefügten Wind nebst entsprechend geänderten Gesamtzustand, um das geostrophische Gleichgewicht zu wahren. Ein Aspekt davon ist, dass nun das recht gering aufgelöste Modell nicht mehr die komplette Hydrostatik halten muss, sondern nur noch den Unterschied der geostrophischen Balance dazu, was über die thermische Windgleichung eine vertikale Komponente einschließt.

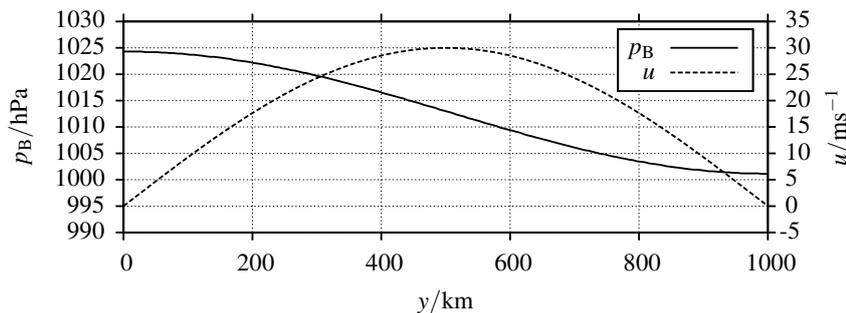
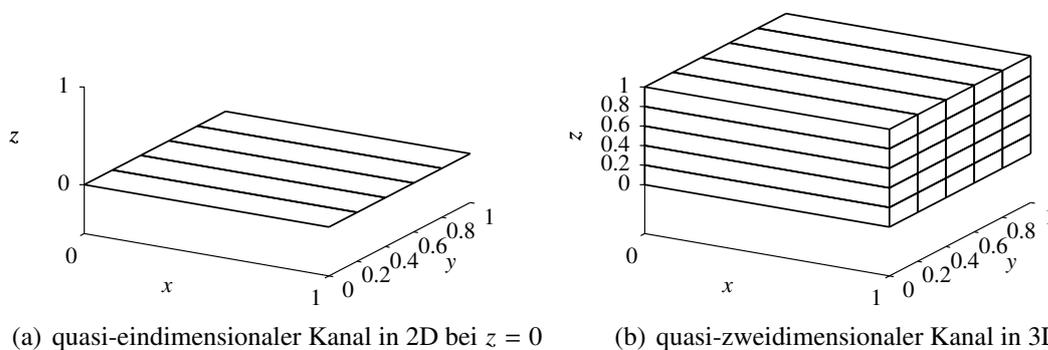
Da die Konfiguration völlig symmetrisch in x ist, wird auf eine Auflösung in diese Richtung verzichtet: In x ist der Basisgrad $k = 0$ und die Elementzahl eins. Das 3D-Problem ist damit quasi-zweidimensional, entsprechend der schematischen Darstellung in Abb. 5.10(b), repräsentiert aber das volle dreidimensionale Wirken der Gleichungen — insbesondere das der Corioliskraft auf den Zonalwind. Ohne jegliche Variation im Anfangszustand in x ist eine räumliche Auflösung in diese Richtung gegenstandslos; der Zustand wird immer x -invariant bleiben. Aufzulösende horizontale Strukturen gibt es neben dem zonalen Profil keine. Es interessiert nur, welche Tendenz Abweichungen vom Startzustand haben. Ausgangspunkt der Auflösung in den verbleibenden Dimensionen sind 20 Elemente in y und 5 Elemente in z , jeweils mit $k = 1$.

Ohne Betrachtung der vertikalen Dimension reduziert sich der nun quasi-eindimensionale Kanal in x und y , entsprechend Abb. 5.10(a), auf das geostrophische Gleichgewicht. Mit dem entwickelten Verfahren der vollen Balancierung von Fluss und rechter Seite („low1bal1“) ist dieses System problemlos stabil. Die Dynamik der Störung über 14 Tage zeigt keinen Trend. Dies belegen die mit „2D low1bal1“ (kurz für zweidimensionalen Lauf mit erster Stufe der Projektion der rechten Seite in den Raum niedriger Ordnung und aktive Flussbalancierung) gekennzeichneten Zeitreihen der relativen \mathcal{L}^2 -Norm der Abweichung von Dichte und Impuls in Abb. 5.11. Ein anderes Bild liefert ein Lauf mit derselben Behandlung der Gleichungen in drei Dimensionen, benannt mit „3D low1bal1“ in Abb. 5.11. Dort wächst schnell ein Abweichungsmaß heran, das an eine bestimmte

⁴ Zur Untersuchung dieser kommen später Profile mit Wendepunkten und auch stärkeren Gradienten zum Einsatz.

| Eigenschaft | Wert (Erläuterung) |
|---------------------|--|
| Dimensionen | 2D (x, y) und 3D (x, y, z) |
| Elemente | variabel, in x nur eines |
| Basisgrad k | 1 in y und z , 0 in x |
| Ausdehnung (x, y) | 1000 km |
| Ausdehnung (z) | 20 km |
| Randbedingungen | reflektiv in y und z , periodisch in x |
| Basiszustand | barotrop-polytrop mit $\partial_z T = -6.5$ K/km |
| Referenzzustand | polytrop ruhend mit $\partial_z T = -6.5$ K/km |
| Grundstrom u | zonaler Wind mit Profil in y , $\sin(s)$ mit $s \in [0, \pi]$ skaliert auf $y \in [0; L_y]$, maximum 30 m/s |
| Störung | keine, nur numerischer Fehler durch Differenz zu ruhendem Referenzfeld |
| Zeitschritt | semi-implizit |
| Simulationsdauer | 14 d für Balancierungsläufe, 1 h für Konvergenzbetrachtung, 1000 d für Langzeitverhalten |

Tabelle 5.2.: Konfiguration zum barotropen Gleichgewicht

Abbildung 5.9.: Profil des Grundstromes $u(y)$ und des Bodendruckes $p_B(y)$ für das barotrope GleichgewichtAbbildung 5.10.: Vereinfachte Kanalgeometrie für geostrophisches Gleichgewicht, Schema des Gitters in normierten Koordinaten, jeweils ohne Variation in x (nur ein Element mit Basisgrad 0)

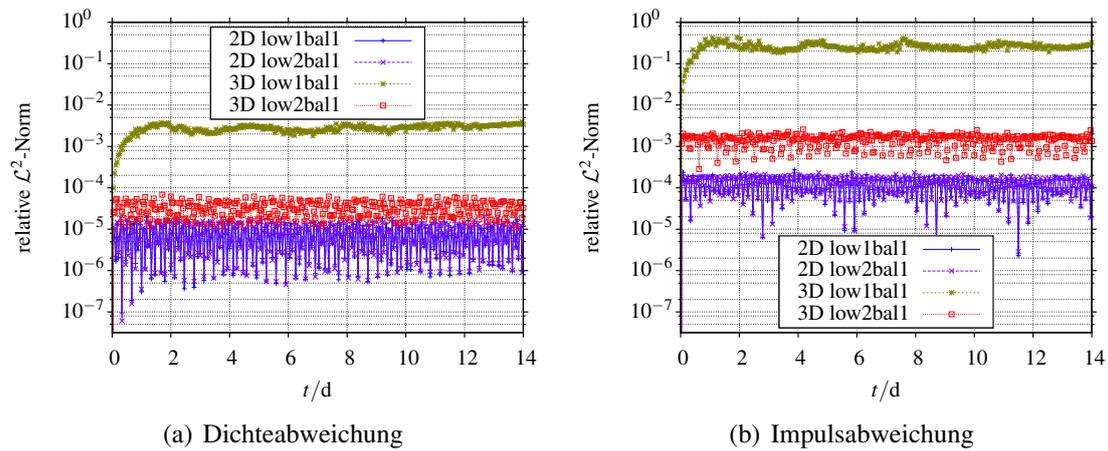


Abbildung 5.11.: Geostrophisches Gleichgewicht ohne („low1bal1“) und mit („low2bal1“) selektiver Balancierung, Zeitreihen der Differenznorm von Dichte- und Impulsverteilung, 2D (x, y bei $z = 0$) und 3D im Vergleich

Obergrenze stößt, im Fall des Impulses an die der vollständigen Umverteilung (relative Differenznorm nahe eins).

Der Grund für diese Unausgeglichenheit liegt darin, dass das Balancierungsverfahren „low1bal1“ aus dem vorigen Abschnitt im Fall der Abbildung der rechten Seite zu weit geht: Es wird der Polynomgrad aller Quellterme in alle Richtungen reduziert, auch wenn dies für das Gleichgewicht Gl. 5.1 gar nicht notwendig ist. Mit Blick auf das Euler-System geht es um das Gleichgewicht von Horizontalableitungen des Druckes mit dem Coriolis-term und von der Vertikalableitung des Druckes mit der Gewichtskraft. Wesentliches Problem bei der vollen Behandlung aller Variablen ist, dass der Coriolis-term zum Zwecke des horizontalen Gleichgewichtes mit dem Druckgradient auch in Vertikalrichtung in seinem Polynomgrad reduziert wird. Dies ist für das Gleichgewicht nicht notwendig und generiert so eine zusätzliche Störung.

Die bestehende Umsetzung des Verfahrens beinhaltet in einer zweiten und vorerst finalen Stufe der polynomialen Balancierung, bezeichnet mit der Kurzform „low2bal1“, für den Coriolis-term lediglich die im Polynomgrad reduzierte Projektion in der Horizontalen. Die Basis zur Projektion reduziert nur den horizontalen⁵ Polynomgrad,

$$\psi \in (P^{k-1} \times P^{k-1} \times P^k) \quad (5.7)$$

(in 3D mit Koordinaten (x, y, z) und normalem Basisgrad k in alle Richtungen). Ebenso wird der Gravitationsterm nur vertikal im Polynomgrad reduziert. Praktisch werden dazu jedem Quellterm Matrizen zugeordnet, welche die \mathcal{L}^2 -Projektion selektiv auf die Richtungen durchführen.

Zukünftige Arbeiten sollten zeigen, ob diese Methodik noch weiter zu verfeinern ist. Der aktuelle Stand bringt wesentliche Verbesserung, was die entsprechenden Kurven für „low2bal1“ in Abb. 5.11 bezeugen: Die Abweichung bleibt klein — um Größenordnungen unter derjenigen ohne selektive Polynomgradreduktion — und zeigt auch keinen langfristigen Anstieg. Das Ziel der Stabilität ist für 3D erreicht, während die bereits zufriedenstellende Situation in 2D von der Änderung unberührt ist.

⁵ Bei Gitterverzerrung durch Orographie beinhaltet die Horizontale des Referenzelementes D im Realelement E auch vertikale Anteile. Wenn solche Verzerrung dominiert, müsste die Umsetzung der Glättung modifiziert werden.

5.2. Konvergenz

Das quasi-zweidimensionale Modell des Kanals mit barotropen Wind ist Dank der minimalen Komplexität geeignet dazu, die Konvergenzordnung des modifizierten DG-Verfahrens unter moderatem Einsatz von Rechenleistung zu prüfen. Laut Cockburn (1998) sollte sie mit dem eingesetzten Gitter bei $k + 1$ liegen, also im aktuell interessanten Fall bei zwei. Dies lässt sich in einem Diagramm darstellen, welches den Diskretisierungsfehler über dem Quadrat der Gitterweite aufträgt. Ein Verfahren der Ordnung zwei zeigt sich durch eine Gerade als resultierenden Graphen, mit steigendem Fehler für steigende Gitterweite. Ob dabei die Definition der Auflösung die Freiheitsgrade der Polynome in den Elementen in Betracht zieht oder nicht, ist irrelevant: Es reicht mit der Elementausdehnung eine dazu zumindest proportionale Größe.

Als Näherung des analytischen Gleichgewichtszustandes, zu dem die Abweichung der numerischen Lösung als Diskretisierungsfehler zu berechnen ist, dient ein Startzustand mit 320 Elementen in y und z , dessen Elemente auch die Quadraturregeln für die relative \mathcal{L}^2 -Norm definieren. Die Auflösungen werden jeweils zwischen einem einzelnen und 80 Elementen variiert, um einen Eindruck vom Konvergenzverhalten zu erhalten. Um auch einen gewissen Einfluss der zeitlichen Diskretisierung und der Verschiebung zum jeweiligen numerischen Gleichgewicht einzubeziehen, wird das Modell jeweils eine Stunde lang integriert.⁶ Der Zeitschritt wird dabei vom Modell selbst nach der CFL-Bedingung Gl. 3.50 automatisch angepasst, wie es auch schon in bisherigen Rechnungen der Fall war. Das verwendete semi-implizite Zeitschrittverfahren mit BDF2A sollte bezüglich des mit der räumlichen Auflösung automatisch verknüpften Zeitschrittes auch Konvergenzordnung zwei bieten.

Die als Auflösung dargestellte Größe ist dabei das Quadrat der normierten Gitterweite

$$(\Delta x_i)^2 = \left(\frac{1}{N_i} \right)^2, \quad (5.8)$$

worin N_i die Anzahl von Elementen in der zur Koordinate x_i gehörigen Dimension darstellt. Mit Konvergenzordnung zwei sollte nun

$$d(\vec{q}) \sim (\Delta x_i)^2 \quad (5.9)$$

für den Fehler d gelten.

Ein einfaches Bild zeigt sich für das quasi-eindimensionale 2D-Kanalmodell ohne Vertikaldimension: In Abb. 5.12 ist der lineare Zusammenhang ersichtlich. Die doppelt-logarithmische Darstellung vereinfacht die Betrachtung über weite Auflösungsbereiche und bestätigt die Erwartung. Auch ist das Verhalten der Variablen qualitativ nicht zu unterscheiden, weshalb die weitere Betrachtung der Dichte genügt.

Im quasi-zweidimensionalen 3D-Kanal, also nach Hinzufügen der Dimension in z , aber noch immer keiner Auflösung in x , ist das Zusammenspiel der Auflösungen entscheidend. Es dominiert wechselseitig die vertikale oder die horizontale Auflösung. Wie Abb. 5.13 in zwei Ansichten belegt, skaliert aber der Fehler ebenfalls wie für $k = 1$ erwartet quadratisch mit der jeweils dominanten Auflösung, sei es $(\Delta y)^2$ oder $(\Delta z)^2$.

Das hier beschriebene Verfahren erfüllt somit auch mit wirkenden Quelltermen und in der Variante mit semi-impliziter Zeitintegration die für das homogene Gleichungssystem in einer Dimension mathematisch bewiesene Konvergenzordnung (Cockburn, 1998) von $k + 1$, hier mit $k = 1$, auch in drei Dimensionen. Zusätzlich zur Konvergenz von Gleichgewichtszuständen zeigt Abb. 6.9 die Konvergenz für zweidimensionale Simulation von barotroper Instabilität.

⁶ Die kurze Simulationszeit ist ein Kompromiss, um hohe Auflösungen zu erreichen.

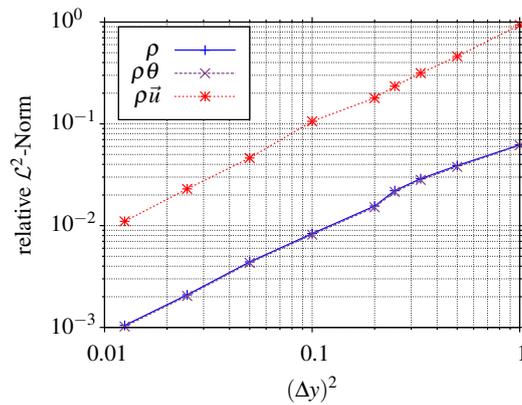


Abbildung 5.12.: Konvergenz des quasi-eindimensionalen 2D-Kanals mit geostrophischem Gleichgewicht, Dichte-, Θ - und Impulsfehler in doppelt-logarithmischer Darstellung

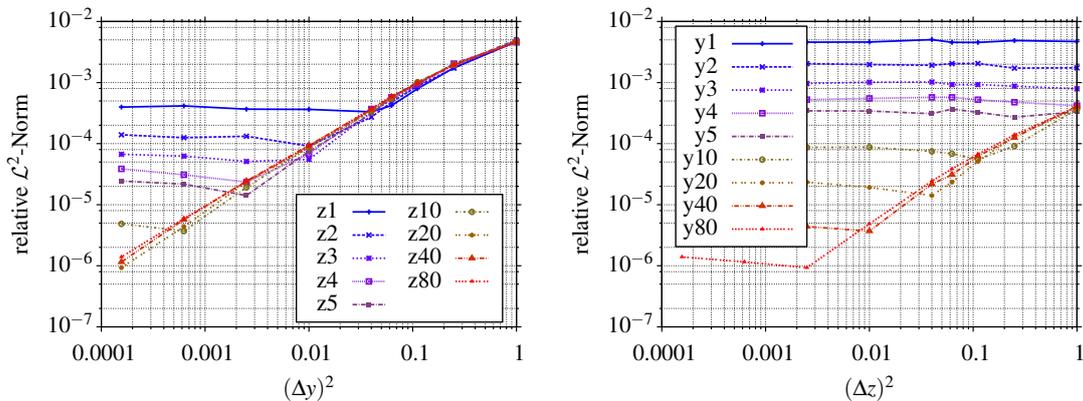


Abbildung 5.13.: Konvergenz des in x symmetrischen quasi-zweidimensionalen 3D-Kanals, Dichtefehler in doppelt-logarithmischer Darstellung, skalierend mit Quadrat der normierten Auflösung in y (links) und z (rechts), einzelne Kurven für die jeweils festgehaltene Auflösung in z bzw. y bezeichnet mit Anzahl der Elemente

Es ist übrigens ein Verdienst der Rechnung mit einem hydrostatischem Referenzfeld, dass in drei Dimensionen der Einfluss der Horizontalauflösung überhaupt zu sehen ist. Wenn die hydrostatische Balance komplett von den Modellgleichungen gehalten werden muss, braucht es viel höhere Auflösungen in z , um den Bereich des horizontalen Fehlers zu erreichen. Die Störung durch den Diskretisierungsfehler des hydrostatischen Gleichgewichtes ist generell deutlich größer als die durch ein gestörtes geostrophisches Gleichgewicht.

5.3. Langzeitstabilität und Erhaltungseigenschaften

Nach der Konvergenzanalyse ist das quasi-zweidimensionale Modell in drei Dimensionen auch dienlich, um die Stabilität des vollen Verfahrens in einer Simulation des durch Diskretisierung gestörten Gleichgewichtes über längere Zeit, hier 1000 Tage, zu beurteilen. Die auf längere Sicht konstanten Zeitreihen der Differenznormen der Systemvariablen, bezogen auf den eigenen Anfangszustand, sind nach Abb. 5.14 Zeugen der erfolgreichen Simulation.

Ein weiterer Aspekt sind die erwarteten Erhaltungseigenschaften. In gewisser Hinsicht ist die Darstellung der Differenz der integrierten Größen über die Zeit für dieses einfache Experiment in Abb. 5.15 täuschend: Da hier nahe dem Gleichgewicht kaum wirkliche Dy-

namik statt findet, besteht geringes Potential für Verletzung der Erhaltungseigenschaften. Trotzdem ist der Blick auf die Dichte bzw. erhaltene potentielle Temperatur in interner Darstellung lehrreich (Abb. 5.15(b), mit Skalierung nach Abs. 3.2.3). Es ist sichtbar, dass aus den Rundungsfehlern der Fließkommadarstellung — denn in diesem Bereich liegen die Inkremente des Fehlers für doppelte Genauigkeit nach IEEE (2008) — auch ein langfristiger Trend folgen kann (Abb. 5.15(a)). Die Masse wird also im Rahmen der Maschinengenauigkeit erhalten, es summieren sich nur Rundungsfehler.⁷

Die kurzfristige Ansicht der quelllosen erhaltenen Variablen in Abb. 5.15(b), mit den klar erkennbaren diskreten Abstufungen aus der begrenzten Genauigkeit der Rechenmaschine, rückt somit das langfristige Bild in Abb. 5.15(a) zurecht. Jenes zeigt mit unter 80 kg globalem Massefehler über 1000 Tage aber auch unabhängig, dass diese Abweichung im Vergleich zur Gesamtmasse von $9.8 \cdot 10^{15}$ kg verschwindend klein ist.⁸ Beim Wert des Integrals von $\rho\theta$ ist es mit $80 \cdot 10^3$ kgK gegen $3.2 \cdot 10^{18}$ kgK ähnlich.

Die zu erhaltenen Variablen sind im Rahmen der Maschinengenauigkeit erhalten. Der Impuls unterliegt Kräften, ist aber in diesem Fall des stabilen Gleichgewichtes langfristig stabil (Abb. 5.14). Die Gesamtenergie Gl. 2.35 ist als abgeleitete Größe formal nicht erhalten, verhält sich aber zumindest für den untersuchten stabilen Gleichgewichtszustand stabil (Abb. 5.15(c)). Die Detailansicht der ersten 1000 s in Abb. 5.15(d) verrät anfänglichen Austausch zwischen innerer und potentieller bzw. kinetischer Energie (Gl. 2.34) mit kleinem tatsächlichen Fehler in der Gesamtenergie. Dieser bleibt aber dann bei beruhigter Dynamik auf Jahresskala konstant bei ca. $3.2 \cdot 10^{13}$ J, was bei integrierter Gesamtenergie des Systems von $2.5 \cdot 10^{21}$ J noch immer vernachlässigbar ist, aber klar eine andere Qualität hat als der Fehler der Erhaltungsvariablen ohne Quellterme in Abb. 5.15.

⁷ Gegen einen solchen Trend durch Rundungen könnte man aus der numerischen Anwendung bekannte Maßnahmen ergreifen, z.B. eine kompensierte Summe nach Kahan (1965).

⁸ Gesamtmasse im Modellgebiet mit ca. 1/500 der Erdoberfläche, passend zur Gesamtmasse der Atmosphäre von ca. $5.2 \cdot 10^{18}$ kg, wie sie sich aus einer Überschlagsrechnung mit einem Bodendruck von 1000 hPa ergibt.

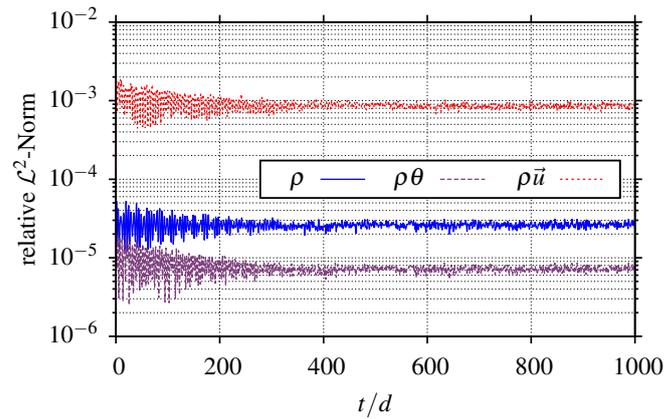
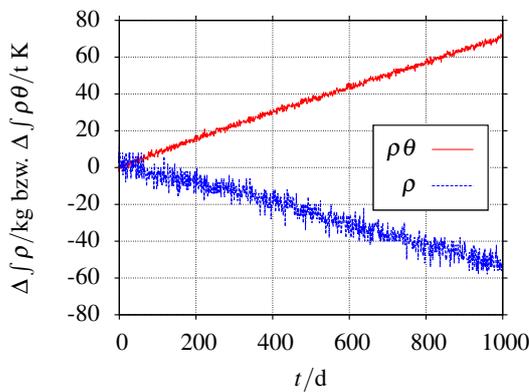
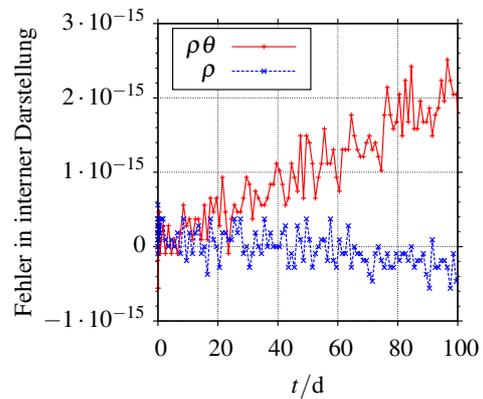


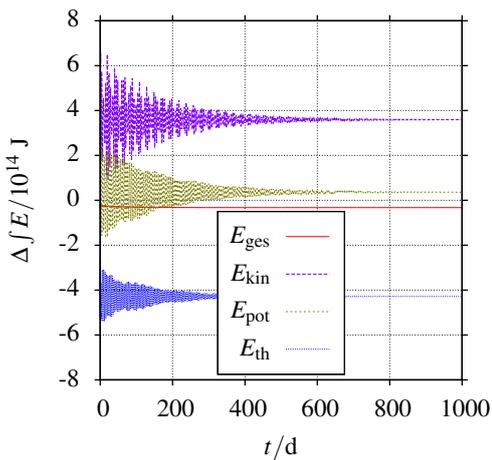
Abbildung 5.14.: Langzeitentwicklung der Differenz in der Verteilung von Dichte, erhaltener potentieller Temperatur und Impuls zum barotrop-geostrophischen Gleichgewicht des quasi-zweidimensionalen 3D-Kanals



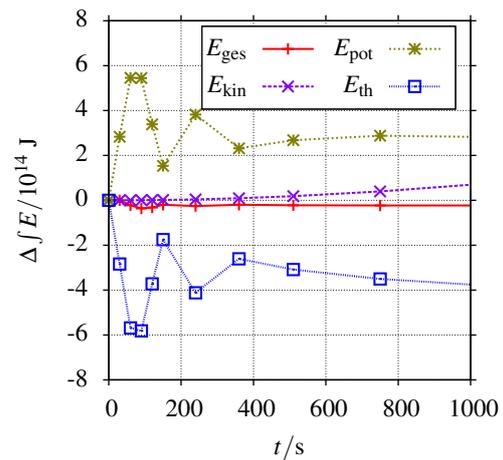
(a) Massendichte und erhaltene potentieller Temperatur



(b) Detailansicht in programminterner Skalierung



(c) Energien (gesamt, kinetisch, potentiell, thermisch)



(d) kurzfristige Entwicklung am Anfang

Abbildung 5.15.: Barotropes Gleichgewicht im quasi-2D-3D-Kanal: Erhaltungseigenschaften; Zeitreihen der Differenz von Integralen über gesamtes Modellgebiet zum Anfangszustand

6. Atmosphärische Testfälle

In Folge des Nachweises der Eignung des Modells für die Simulation grundlegender atmosphärischer Gleichgewichtszustände ist es obligatorisch, die Lösungen von dynamischen Problemen mit der existierenden Literatur zu vergleichen. Verschiedene Autoren haben Testfälle für Atmosphärenmodelle in verschiedenen Skalen und Dimensionskonfigurationen veröffentlicht. Für die Bewertung der Fähigkeit des beschriebenen DG-Verfahrens, typische atmosphärische Dynamik in mittleren Breiten zu berechnen, empfiehlt sich eine Reihe von Tests, angefangen mit dem Aufsteigen einer warmen Blase (kreisförmige Temperaturstörung in 2D) in der Mikroskala in einem Gebiet von einem Kilometer Ausdehnung und Auflösung in den Meterbereich, über mesoskalige Tests der Wellenausbreitung aus Störung der potentiellen Temperatur bzw. durch die Orographie, bis hin zur synoptischen Skala mit einer Adaption eines barotrop instabilen Grundstroms, welche die horizontale Modellgeometrie für die Untersuchungen von barokliner Instabilität im folgenden Kapitel einführt.

6.1. Aufsteigende warme Blase

Der Testfall der aufsteigenden warmen Blase („thermal bubble“, „rising bubble“) als Phänomen auf der Mikroskala wurde von Robert (1993) mit Bezug auf frühere Arbeiten und unter Einsatz eines semi-Lagrangeschen und semi-impliziten Modells dargestellt und später von Giraldo und Restelli (2008) u.a. für DG hoher Ordnung aufgegriffen. Diese Problemfamilie ist am effizientesten mit expliziter Zeitintegration zu lösen, da die Umsetzung der semi-impliziten Formulierung auf wenige vertikale Schichten und die typischerweise große Asymmetrie der Auflösung bei größeren Skalen ausgerichtet ist.

Es sind hier zwei Varianten dieses Testfalles gezeigt: Variante 1 ist die Blase mit scharfer Kontur entsprechend dem ersten Experiment von Robert (1993), Variante 2 entspricht Testfall 3 von Giraldo und Restelli (2008) („Robert Smooth Bubble“) mit glattem Profil der Blase. Die Konfiguration besteht in einer zweidimensionalen Modelldomäne von 1 km Ausdehnung in x (horizontal) und z (vertikal) und somit ohne Wirkung von Corioliskraft für Variante 1. Variante 2 erhöht in z auf 1.5 km. Alle Ränder sind reflektiv. Der Startzustand basiert auf einer ruhenden isentropen Atmosphäre (siehe Abs. B.2.3) mit $\theta = 303.15$ K für Variante 1, 300 K für Variante 2. In beiden Fällen herrscht ein Bodendruck von 1000 hPa. Diese ausgeglichene Atmosphäre wird mit einer Störung der potentiellen Temperatur mit einem Maximalbetrag von 0.5 K in einem kreisförmigen Bereich mit 500 m Durchmesser. Variante 1 nutzt dazu ein konstantes Profil, d.h. die potentielle Temperatur ist an der Grenze des Störungsbereiches unstetig. Bei Variante 2 ist das Profil durch eine Sinuskurve mit Maximum im Mittelpunkt definiert, welche am Rand stetig und auch einfach differenzierbar ist. Beide Varianten platzieren den Mittelpunkt der Störung bei $x = 500$ m und $z = 260$ m, so dass unter der Blase ein ungestörter Bereich von 10 m bleibt. Der Vergleich findet primär bei einer Elementgröße von 5 m statt, also horizontal 200 Elemente mit $k = 1$, bei Variante 2 vertikale 300 Elemente gleicher Größe. Der Zeitschritt mit expliziter Integration beträgt in dieser Auflösung im Mittel 2.2 ms.

Die Entwicklung zeigt expansiven Auftrieb der erwärmten Blase mit differenzierter Dynamik im Volumen, welches sich in unterschiedlicher Form einrollt. Starke Strukturen

sind für Variante 1 in Abb. 6.1 sichtbar.¹ Der Vergleich mit Robert (1993, Abb. 1 und 2) zeigt qualitative Übereinstimmung in Aufstiegsgeschwindigkeit und in den auftretenden Wirbelstrukturen, mit Tendenz zu schärferen Gradienten bei der hier höheren Auflösung (Gitterweite in der Referenz 10 m).

Ein Vergleich bis ins kleinste Detail ist problematisch, da diese Formulierung der warmen Blase mit unzeitigem Rand stark davon abhängt, wie dieser in die Diskretisierung mit rechteckigen Elementen übertragen wird. So könnte der zentrale Überschießer an der Oberkante auch ein Artefakt der Entscheidung zwischen gerader und ungerader Elementzahl in x sein.²

Die Problematik der Detaildarstellung wird durch eine weiche Definition der Temperaturstörung vermieden, was Variante 2 auszeichnet. Hier ist die Dynamik homogener und es bilden sich nur zwei Wirbel, an denen sich die verjüngte Blase nach gewisser Zeit aufrollt. Die Ergebnisse von Giraldo und Restelli (2008, Abb. 5 und 6) finden sich in Abb. 6.2 und Abb. 6.3 wieder.

Die turbulente Dynamik mit hohem Polynomgrad aus der Referenz ist hier nicht zu erkennen, dies kann aber durchaus eine spezielle Eigenschaft des DG3-Verfahrens von Giraldo und Restelli (2008) sein. Allerdings zeigt Abb. 6.1, dass bei Vorgabe entsprechend starker Gradienten am Rand der Blase solch turbulente Dynamik auch von dem hier betrachteten DG-Verfahren produziert wird. Eventuell ist hier ein Unterschied in der Diffusivität der Verfahren zu sehen, bzw. einfach eine Erhöhung der Auflösung notwendig, um mit dem höheren Polynomgrad gleichzuziehen.

Die Vertikalschnitte in Abb. 6.3 zeigen jedenfalls einen vergleichbaren Aufstieg (Position nach vergangener Zeit) und auch passende Stärke der verdichteten Störung, wobei eine höhere Auflösung noch Abweichungen reduzieren kann, wie schon der Vergleich mit geringeren Auflösungen und ihren größeren Abweichungen im Profil zeigt.

6.2. Schwerewellen

Der nächste Testfall stellt einen Wechsel in die Mesoskala dar, mit einem Modellgebiet von 300 km Breite und 10 km Höhe. Nach Skamarock und Klemp (1994) ist der Untersuchungsgegenstand eine uniform geschichtete Atmosphäre (siehe Abs. B.2.5) mit $N_{\text{brunt}} = 0.01$ Hz mit konstantem Wind von 20 m/s in x . In dieser Richtung herrschen auch periodische Randbedingungen, während in z weiterhin reflektive Ränder aktiv sind. Die potentielle Temperatur erfährt eine Störung von

$$\theta(x, z) - \theta_{\text{strat}}(z) = \Delta\theta \frac{\sin\left(\pi \frac{z}{L_z}\right)}{1 + \left(\frac{x-x_c}{a}\right)^2} \quad (6.1)$$

mit der Amplitude $\Delta\theta = 10$ mK und Zentralkoordinate $x_c = 100$ km sowie Breitenparameter $a = 5$ km. Durch diese Störung werden sich horizontal ausbreitende Schwerewellen angeregt, die zusammen mit der Advektion Störungsmuster in das Modellgebiet verbreiten. Es ist zu beachten, dass Skamarock und Klemp (1994) mit der Boussinesq-Approximation arbeiten, jedoch ist der Vergleich der horizontalen Wellenausbreitung davon wenig beeinflusst. Die DG-Diskretisierung arbeitet wie folgend immer mit $k = 1$. Horizontal wird mit 300 und vertikal mit 10 Elementen aufgelöst. Der explizite Zeitschritt beträgt im Mittel 0.42 s, der semi-implizite 1.9 s.

¹ Für die Abbildungen der aufsteigenden Blasen wurde die bekanntermaßen suboptimale Regenbogenfarbskala verwendet, um die Vergleichbarkeit mit der Referenz zu vereinfachen. Zur Problematik siehe Borland und Taylor II (2007).

² Unterschiede dieser Art wurden während der Modellentwicklung beobachtet.

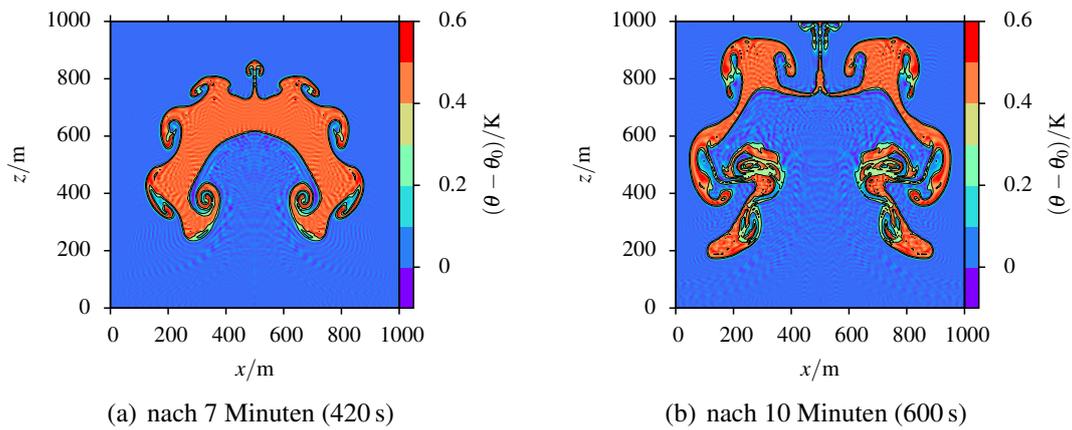


Abbildung 6.1.: Aufsteigende Blase, Variante 1; Störung der potentiellen Temperatur, Konturen bei 0.2 K und 0.4 K

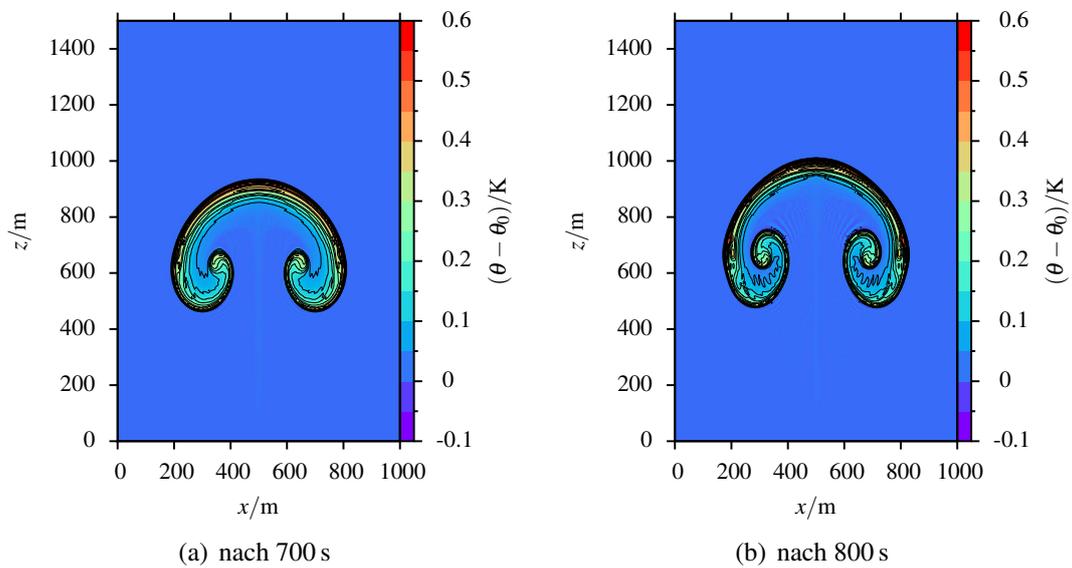


Abbildung 6.2.: Aufsteigende Blase, Variante 2; Störung der potentiellen Temperatur mit Konturintervall 0.05 K, ohne Nulllinie, negativ gestrichelt

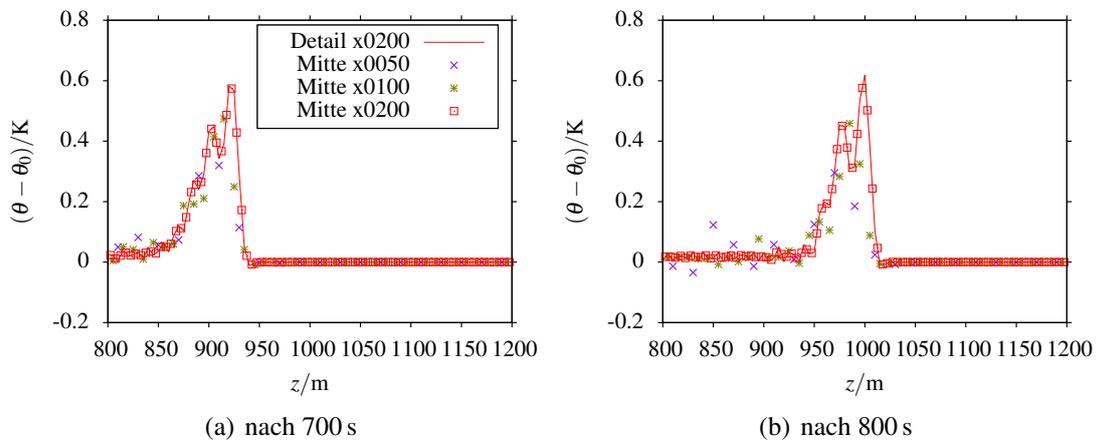


Abbildung 6.3.: Aufsteigende Blase, Variante 2; Störung der potentiellen Temperatur im Vertikalschnitt für verschiedene Auflösungen (stückweise lineare Darstellung Elementgröße 5 m (200 Elemente in x , dazu Elementmittelpunkte für 200, 100 und 50 Elemente in x und entsprechender Anzahl in z zur homogenen Auflösung)

Die anfängliche Störung in der potentiellen Temperatur ist in der obersten Darstellung in Abb. 6.4 zu sehen. Die beiden weiteren Darstellungen zeigen das Ergebnis der Zeitintegration über 3000 s mit explizitem und semi-impliziten Zeitschritt. Die Unterschiede zwischen beiden sind sehr klein und auch der Vergleich mit Skamarock und Klemp (1994, Abb. 1) fällt positiv aus: abgesehen von vertikaler Deformation, die durch die unterschiedlichen Näherungen zu erklären sein sollte, passt die horizontale Struktur der Simulation hier gut zur Vorgabe. Tatsächlich passen die Ergebnisse in Abb. 6.4 in der Horizontalstruktur besser zur analytischen Lösung von Skamarock und Klemp (1994) als die Vergleichsergebnisse in der Referenz (in Skamarock und Klemp (1994, Abb. 1) erkennbarer Versatz in x).

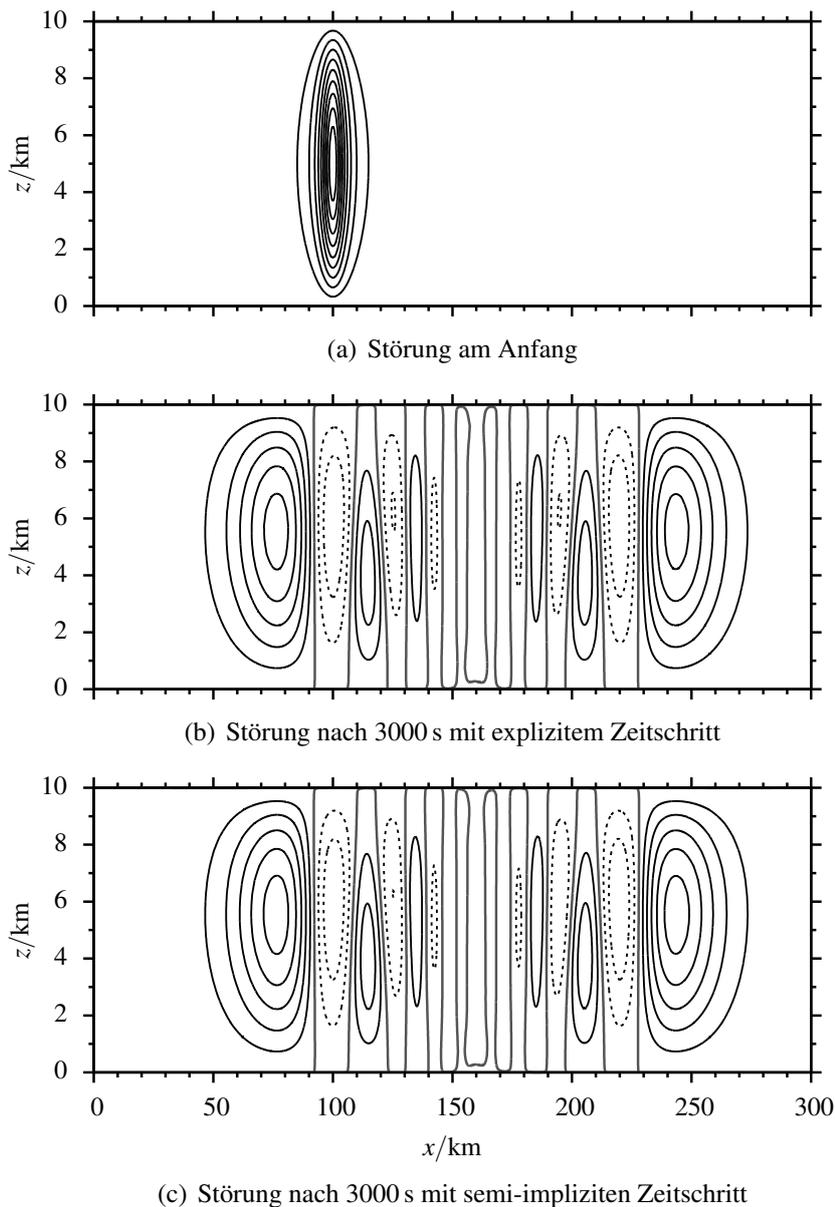


Abbildung 6.4.: Schwerewellen-Vergleich, Darstellung der Differenz von θ zum Referenzzustand in mK, Konturintervall 1 mK für den Anfangszustand, 0.5 mK für die beiden Endzustände (gestrichelte Konturen negativ, zum direkten Vergleich mit Skamarock und Klemp (1994))

6.3. Bergüberströmung

Die bisherigen Testfälle wiesen keinerlei Gitterdeformation auf, sie waren mit horizontal bzw. vertikal konstanter Gitterauflösung und ohne den Rand verformende Orographie formuliert. Beide Umstände werden im Testfall der Bergüberströmung in der zweidimensionalen x - z -Konfiguration geändert. Zudem findet auch eine absorbierende Randbedingung in Form der in Abs. 3.3.4 beschriebenen Absorptionsschicht Verwendung. Somit ist dies eine wichtige Demonstration von mehreren Aspekten des umgesetzten DG-Verfahrens. Wie auch schon Robert (1993) setzt die Referenz hier ein semi-Lagrangesches und semi-implizites Modell ein. Die Rechnungen hier sind entsprechend ebenfalls mittels semi-implizitem Zeitschritt durchgeführt. Der Zeitschritt liegt dabei je nach Konfiguration im Mittel zwischen 2.5 s und 12 s.

Die Basis ist die klassische Bergüberströmung, wie sie von Pinty et al. (1995) dargestellt ist, mit einem Modellgebiet von 500 km Breite und 20 km Höhe. Referenzdruck und -temperatur sind 1013 hPa und 273.15 K. Diese Werte sind allerdings von Pinty et al. (1995) nicht erwähnt, wie auch die Erdbeschleunigung von 9.806 m/s^2 . Der Startzustand ist eine isotherme Atmosphäre (siehe Abs. B.2.1) mit konstant 32 m/s Wind in x -Richtung. Gleichzeitig dient dieser Zustand, der ohne Beachtung der Orographie aufgestellt ist, als Referenzfeld für die Euler-Gleichungen in Form von Gl. 2.39.

Die Dynamik wird durch zwei verschiedene Orographien ausgelöst, welche dem vorgegebenen Wind ein Hindernis bieten. Der erste, „linear“ genannte Fall ist ein kleiner Hügel in der Form des hill-Profiles in Tab. A.1 (Versiera der Agnesi) mit Höhe 1 m und Breitenparameter 16 km. Der folgende „nichtlineare“ Fall erhöht den Hügel auf 800 m. Es ist zu betonen, dass hier der Hügel nicht inkrementell hinzugefügt, sondern von Anfang an vorgegeben wird. Das führt am Anfang zur Generation von starken Schallwellen, die am Oberrand reflektiert werden, wenn die Absorptionsschicht dies nicht verhindert. Eine solche ist auch in der Referenz im Einsatz, an den periodischen Rändern in x sowie am an sich reflektierenden Oberrand, die Abweichung vom Anfangszustand unterdrückend. Die Ausdehnung der Absorptionsschicht ist 100 km auf jeder Seite in Horizontalrichtung und 6 km am Oberrand, mit voller Wirkung für alle Variablen.

Dem Beispiel von Pinty et al. (1995) folgend, verzichtet die Darstellung auf die horizontalen Randbereiche und stellt das Geschehen horizontal von 100 km bis 400 km dar, während in z der volle Bereich von 0 km bis 20 km gezeigt wird. Die lokalisierte Orographie, verbunden mit der weiterhin lokalisierten Dynamik, bietet eine Gelegenheit, die einfache räumliche Gitteradaptivität aus Abs. 3.1.3 zu testen. Neben der isotropen Auflösung mit 50 mal 20 Elementen (100 mal 40 Freiheitsgraden der polynomialen Darstellung) gibt es als Zwischenstufe zur verdoppelten Auflösung die Variante mit gleichbleibender Anzahl Elemente (50 mal 20), die aber horizontal zur Mitte und vertikal zum Boden hin verdichtet werden, so dass der Bereich der stärksten Dynamik, vergleichbar der doppelten Auflösung, erfasst ist. Insbesondere die Wirkungsbereiche der Absorptionsschicht sind dabei deutlich gröber aufgelöst.

Der erste, „lineare“ Fall, findet nach 40 000 s Integrationszeit sein Gegenstück in Pinty et al. (1995, Abb. 1b) („hydrostatic linear case“). Die Ergebnisübersicht als Darstellung des angeregten Vertikalwindes in Abb. 6.5 fasst einige Erkenntnisse zusammen. So passt die Struktur der Windstörungen durchaus zur Referenz, besser mit der feineren Auflösung. Der Effekt der Absorptionsschicht ist deutlich zu erkennen; Wellen, die sich hinter dem Hügel ausbreiten, werden erfolgreich herausgefiltert. Zugleich ist offensichtlich, dass die hier eingesetzte Absorptionsschicht an der Oberkante des Modells wesentlich behutsamer agiert als bei Pinty et al. (1995).

Das qualitative und auch quantitative Bild des hochaufgelösten Laufs mit Absorptions-

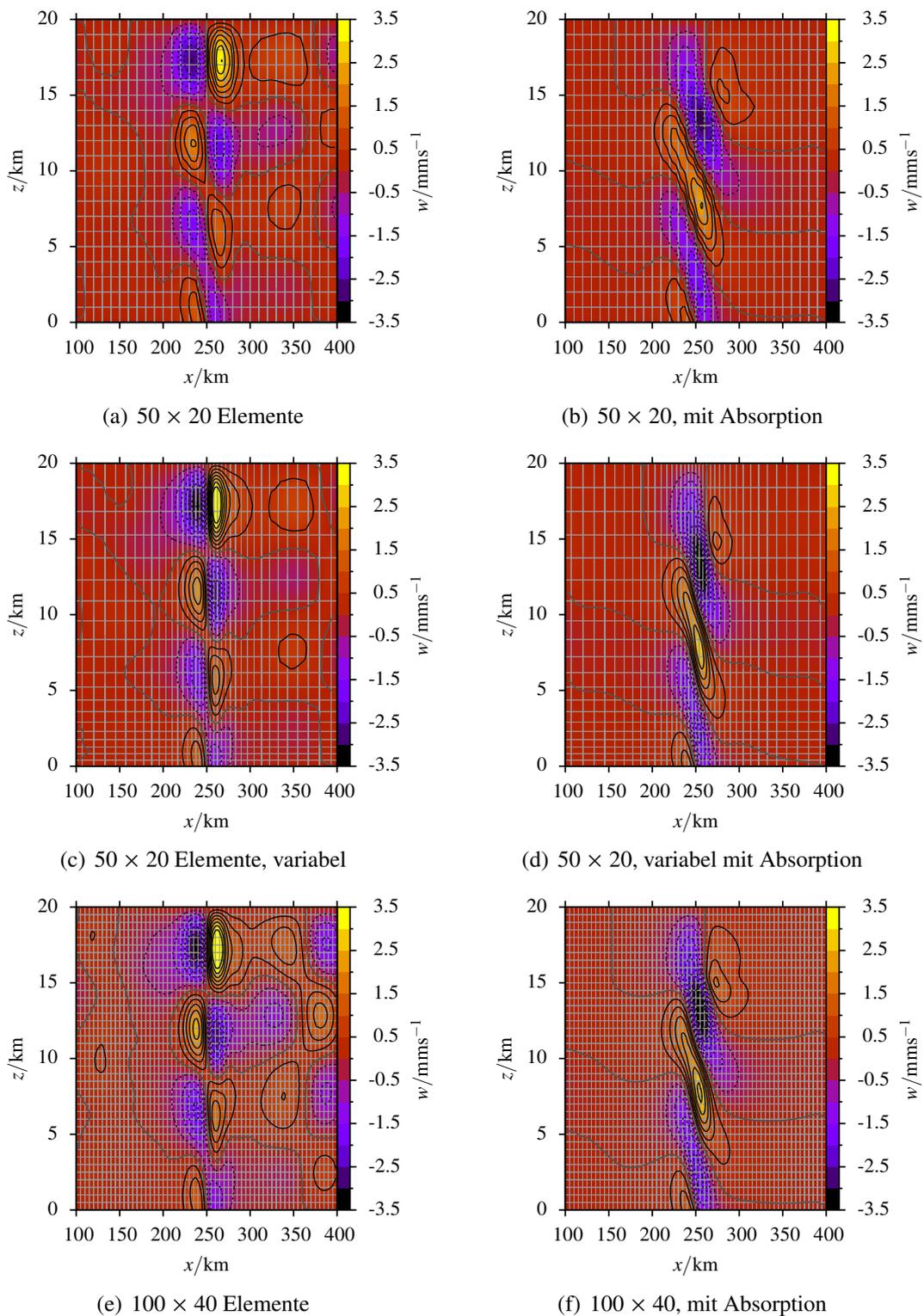


Abbildung 6.5.: Lineare Bergüberströmung mit und ohne Absorptionsschichten sowie mit verschiedenen Gitterkonfigurationen, Vertikalwind in mm/s mit 0.5 mm/s Konturintervall (gestrichelte Konturen negativ), Gitter (Elementgrenzen) durch graue Linien dargestellt, Ausschnitt aus Modelldomäne zum direkten Vergleich mit Pinty et al. (1995, Abb. 1b)

schicht (Abb. 6.5(f)) gibt die Struktur aus Pinty et al. (1995, Abb. 1b) zufriedenstellend wieder. Insbesondere fällt auf, dass die Lösung mit halber Auflösung aber räumlicher Adaptivität (Abb. 6.5(d)) wenig Unterschied zur voll hochaufgelösten (Abb. 6.5(f)) zeigt. Es bringt bei diesem Testfall wenig Vorteil, die Randzonen gut aufzulösen und so kann mit deutlich reduziertem Rechenaufwand ein äquivalentes Ergebnis erzielt werden.

Nicht ganz so einfach sieht es bei dem „nichtlinearen“ Fall in Abb. 6.6 aus, der mit Pinty et al. (1995, Abb. 8b), dem „hydrostatic nonlinear case“ zu vergleichen ist, wieder in der Darstellung des Vertikalwindes. Hier zeigt sich, dass zu feine Auflösung in der Dämpfungszone sogar für Oszillationen hinter dem Berg sorgt (Abb. 6.6(f)), die von der Absorptionsschicht nicht hinreichend getilgt werden können. Allerdings sind die verbleibenden Oszillationen schwach im Vergleich zu den zentralen Wellen über dem Berg, wodurch sich die Wirkung der Absorptionsschicht trotzdem sehr deutlich im Vergleich zeigt. Bei Pinty et al. (1995) sind solche kleinskaligen Wellen im Dämpfungsbereich ebenfalls in den sehr unruhigen Nullkonturen angedeutet, so dass der Unterschied zur hochaufgelösten Darstellung in Abb. 6.6(f) nicht schwer wiegt. Trotzdem fällt auf, dass das adaptive Gitter (Abb. 6.6(d)) hier bezogen auf die Elimination der nebenläufigen Wellen das beste Ergebnis erzielt — mit weniger Rechenaufwand. In diesem Fall ist es ca. ein Faktor neun in der benötigten Rechenzeit.

Der Testfall der Bergüberströmung hat das Modell bestätigt und konnte eindrucksvoll demonstrieren, dass die adaptive Gitterauflösung, bei einer Konfiguration, die sich dafür offensichtlich anbietet, sehr effektiv in Genauigkeit und Rechenzeit sein kann. Die einfache Absorptionsschicht bildet hinreichend die aus Pinty et al. (1995) nach, wenn sie auch etwas schwächer eingestellt ist. Dieses Ergebnis schließt die Betrachtung von mesoskaligen Vorgängen im x - z -Modell ab.

6.4. Barotrope Instabilität

Den Abschluss der Testreihe bildet die Simulation von barotroper Instabilität eines idealisierten mittlere-Breiten-Jets, die wie z.B. von Etling (2008) beschrieben durch Wendepunkte im Windprofil erzeugt wird. Die Corioliskraft spielt fortan eine bestimmende Rolle. Die Konfiguration bezieht sich auf Galewsky et al. (2004) und beginnt auch mit den Flachwassergleichungen in 2D. Dieser Testfall dient aber als Vorlage für Arbeiten im folgenden Kapitel, in dem schrittweise das Problem auf die Euler-Gleichungen und dann in die dritte Dimension erweitert wird.

Der Flachwasser-Testfall ist auf der Erdkugel definiert und muss zur Anwendung auf das vorliegende Kanalmodell in dessen Geometrie übertragen werden. Somit ist klar, dass es nicht um genaue Reproduktion, sondern um eine Analogielösung geht. Ziel ist ein barotrop instabiler Grundstrom, der auf ähnlichen Zeitskalen ähnliche Strukturen wie Galewsky et al. (2004) zeigt. Dazu wird ein in x periodischer Kanal einer Länge von 28 000 km und Breite 6000 km festgelegt. Die Mitte des Kanals liegt bei 45 °N, mit dem durch Gl. 2.2 definierten Coriolisparameter ist eine Näherung der mittleren Breiten vollzogen. Der zonale geostrophische Grundstrom im Flachwassermodell (siehe Abs. 4.7) hat wie bei Galewsky et al. (2004) eine maximale Geschwindigkeit von 80 m/s. Das Profil ist einfach ein Quadratsinus (bzw. verschobene Sinuskurve) nach Tab. A.1, der zentriert mit einer kompletten Breite von 2400 km die Vorticity-Extrema der Vorlage gut trifft und noch immer etwas Platz zu den reflektierenden Rändern in y hat, um anfänglich ungestörte Dynamik zu entfalten.

Der balancierte, aber dank Wendepunkten instabile Grundzustand mit Basishöhe 10 km wird um eine im Maximum 80 m starke Höhenstörung vom Gleichgewicht entfernt. In

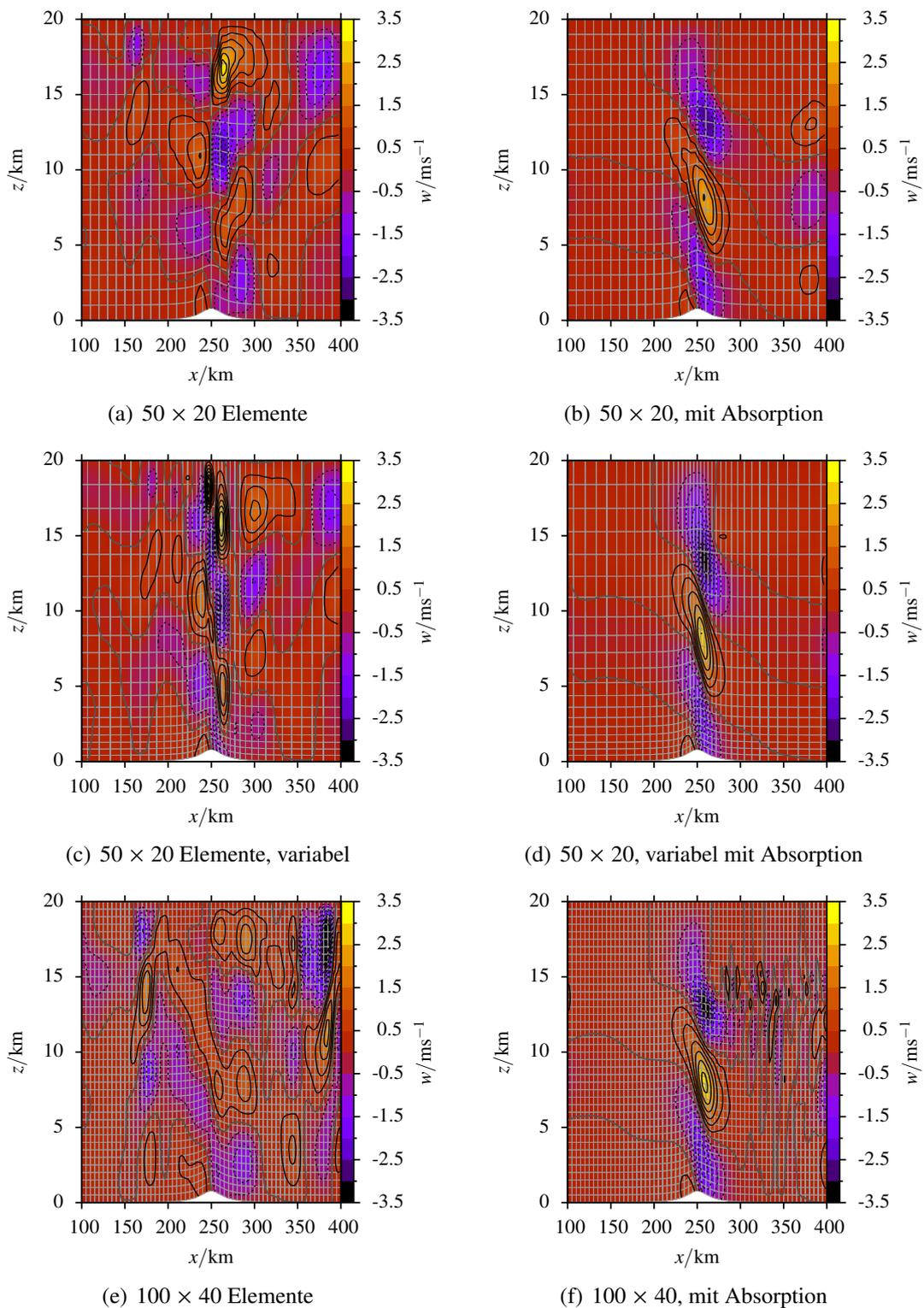


Abbildung 6.6.: Nichtlineare Bergüberströmung mit und ohne Absorptionsschichten sowie mit verschiedenen Gitterkonfigurationen, Vertikalwind in m/s mit 0.5 m/s Konturintervall (gestrichelte Konturen negativ), Gitter (Elementgrenzen) durch graue Linien dargestellt, Ausschnitt aus Modelldomäne zum direkten Vergleich mit Pinty et al. (1995, Abb. 8b)

Anlehnung an die Struktur in Galewsky et al. (2004) folgt die Störung einem zentrierten Gaußprofil bzw. als Produkt einer Gaußfunktion in x und einer in y , jeweils mit relativer Halbwertsbreite von 0.131, d.h. 3668 km in x und 786 km in y . Ein Bild von diesem Anfangszustand vermittelt Abb. 6.7.

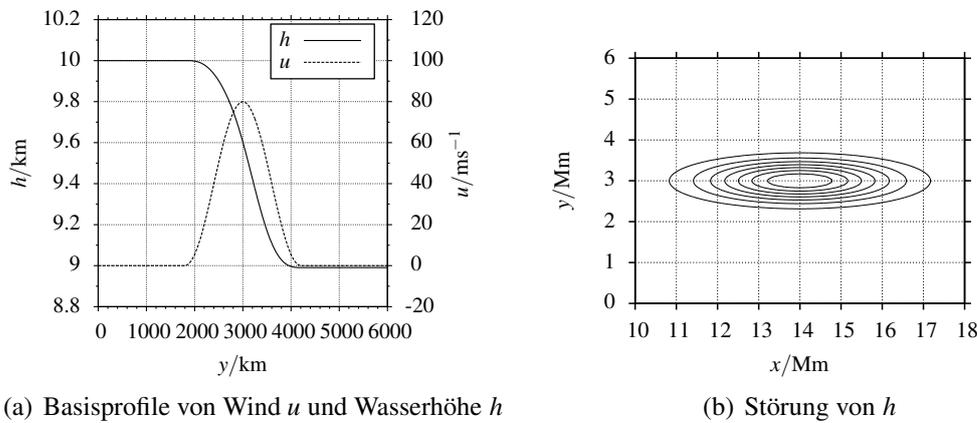


Abbildung 6.7.: Startzustand für Galewsky-Testfall, ungestörte Profile von Wind und Wasserhöhe, sowie Störung der Höhe (Konturintervall 10 m beginnend bei 10 m)

Die Referenz sind Ansichten der (relativen) Vorticity

$$\zeta = (\vec{\nabla} \times \vec{u})_z = \partial_x v - \partial_z u \quad (6.2)$$

nach 96, 121 und 144 h. Der dort genutzten T341 Auflösung kommt ein DG-Lauf mit 456 Elementen in x und derer 96 in y nahe. Der Zeitschritt der expliziten Integration liegt im Mittel bei 24 s. Die Vergleichsbilder entsprechend Galewsky et al. (2004, Abb. 4) sind in Abb. 6.8 zu finden. Sie zeigen das anfängliche Anwachsen einer durch die Störung ausgelösten Welle mit einer auf die Kanallänge bezogenen Wellenzahl von fünf bis sechs (96 h), die nach 120 h Ansätze von Wirbelbildung in zyklonaler (Nordseite) bzw. antizyklonaler (Südseite) Drehrichtung zeigt. Nach 144 h ist die Kanalbreite gefüllt und die Welle mit ausgeprägten sich ablösenden Wirbeln kommt in Kontakt mit den reflektierenden Rändern, worauf sie in der weiteren Entwicklung aufbricht und chaotische Strukturen hinterlässt.

Beim Vergleich ist stets zu beachten, dass Verzerrungen durch die unterschiedliche Geometrie unvermeidlich sind. Die Referenzdarstellungen sind kartestische Darstellungen aus dem Gradnetz auf einer Kugel, was die nördlichen Strukturen in die Breite zieht. Daher sind die Darstellungen aus dem Kanalmodell schon daher näher an Symmetrie in y , abgesehen von eventuell sichtbarem Einfluss der Näherung des Coriolisparameters. Weiterhin kommt die sich entfaltende Instabilität im dritten Bild in Abb. 6.8 dem reflektiven Rand nahe, so dass die weitere Entwicklung (folgendes Bild nach neun Tagen, ohne Vergleich in der Referenz) von der Interaktion reflektierter Wellen geprägt ist. Die drei Vergleichszeitpunkte bis 144 h Simulationszeit stimmen in den wesentlichen Strukturen mit der Referenz überein: Die sich eindrehenden und abtrennenden Minima bzw. Maxima entsprechen der Vorgabe in räumlicher und zeitlicher Struktur und geben so die Entwicklung der barotropen Instabilität äquivalent wieder.

Ein Unterschied besteht im Fehlen der kleinskaligen numerischen Artefakte, z.B. am Rand des ersten Wirbels im Nordwesten, die auf die spektrale Methode von Galewsky et al. (2004) zurückgehen. Die Vorticity ist hier aus zentralen Differenzen einer Abtastung mit jeweils einem Punkt im Elementzentrum ausgewertet.³ Die durch diese Glättung

³ Siehe Abs. A.4 zur Darstellungsproblematik.

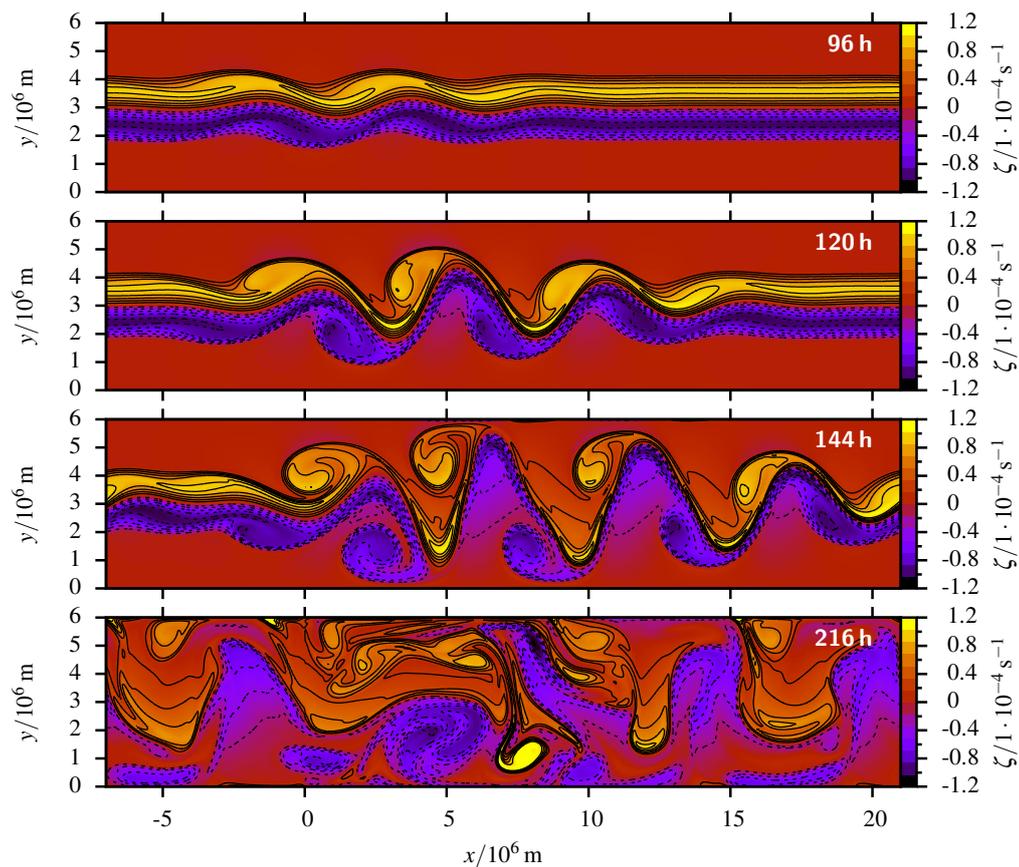


Abbildung 6.8.: Galewsky-Testfall, Vergleich ohne Diffusion, 456 Elemente in x und 96 in y ($x456y96$), Vorticity nach 96, 122 und 144 h für den Vergleich mit Galewsky et al. (2004, Abb. 4), dazu noch weitere Ansicht nach 216 h, Konturintervall $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

vermiedenen numerischen Artefakte sind aber anderer Natur, bzw. bei dieser hohen Auflösung gar nicht erkennbar. Dadurch ist in einer Reihe von Läufen mit verschiedenen Auflösungen durchaus Konvergenz sichtbar, sei es in der Ansicht nach 144 h (Abb. 6.10) oder auch tatsächlich in der relativen Fehlernorm zur höchsten Auflösung (912 Elemente in x), wie Abb. 6.9 zeigt.

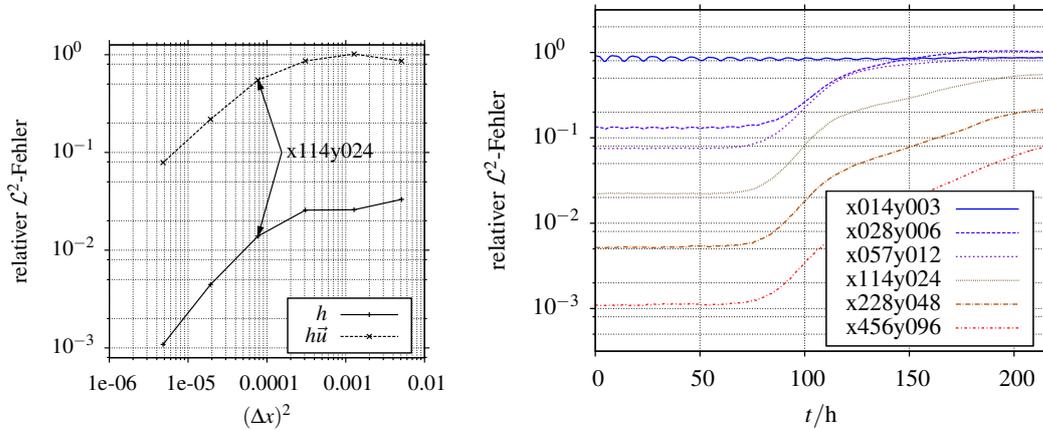


Abbildung 6.9.: Konvergenzordnung im Galewsky-Testfall, *links*: relativer \mathcal{L}^2 -Fehler von Dichte und Impuls nach 216 h (bezogen auf Lauf mit Auflösung $x912y192$), *rechts*: Zeitreihen des Impulsfehlers

Es ist ab 114 Elementen in x die Konvergenzordnung 2 in der doppelt-logarithmischen Darstellung in Abb. 6.9 zu ersehen. In der Zeitreihendarstellung des Fehlers daneben ist auch zu erkennen, dass diese Auflösung eine der ersten ist, deren Fehler erkennbar mit dem Ausbrechen der Instabilität verknüpft ist.

Die geringeren Auflösungen stellen das Anfangsfeld so grob dar, dass es kaum oder gar nicht zur Instabilität kommt, was sich wiederum in Abb. 6.10 widerspiegelt. Mit 114 Elementen in x ist, wenn auch die Vorticity-Gradienten klar unteraufgelöst sind, mit der Entwicklung und Ablösung von Wirbeln auf der vorgegebenen Zeitskala die wesentliche Dynamik dargestellt. Das ist insofern relevant, als das diese horizontale Auflösung als Basis für folgende dreidimensionale Läufe über längere Zeit dient. Sie ist fein genug, um die Dynamik barotroper Instabilität grundsätzlich abzubilden und ist gleichzeitig gering genug, um in vertretbarer Zeit Ergebnisse mit der verfügbaren Entwickler-Rechentechnik zu erzielen.

Bevor es aber im nächsten Kapitel um Erweiterung der Instabilitätsexperimente geht, bietet die Beschreibung von Galewsky et al. (2004, Abb. 6) noch eine Verifikationsmöglichkeit des Diffusionsansatzes aus Abs. 3.4. Das Experiment in der Vergleichsauflösung wird mit hinzugefügter $\vec{\nabla}^2$ -Diffusion und Koeffizient $\mu = 1 \cdot 10^5 \text{ m}^2/\text{s}$ für alle Variablen wiederholt. Dabei zeigt sich die Dämpfung der Instabilität, welche sowohl in der Referenz als auch in dem Ergebnis Abb. 6.11 deutlich ist.

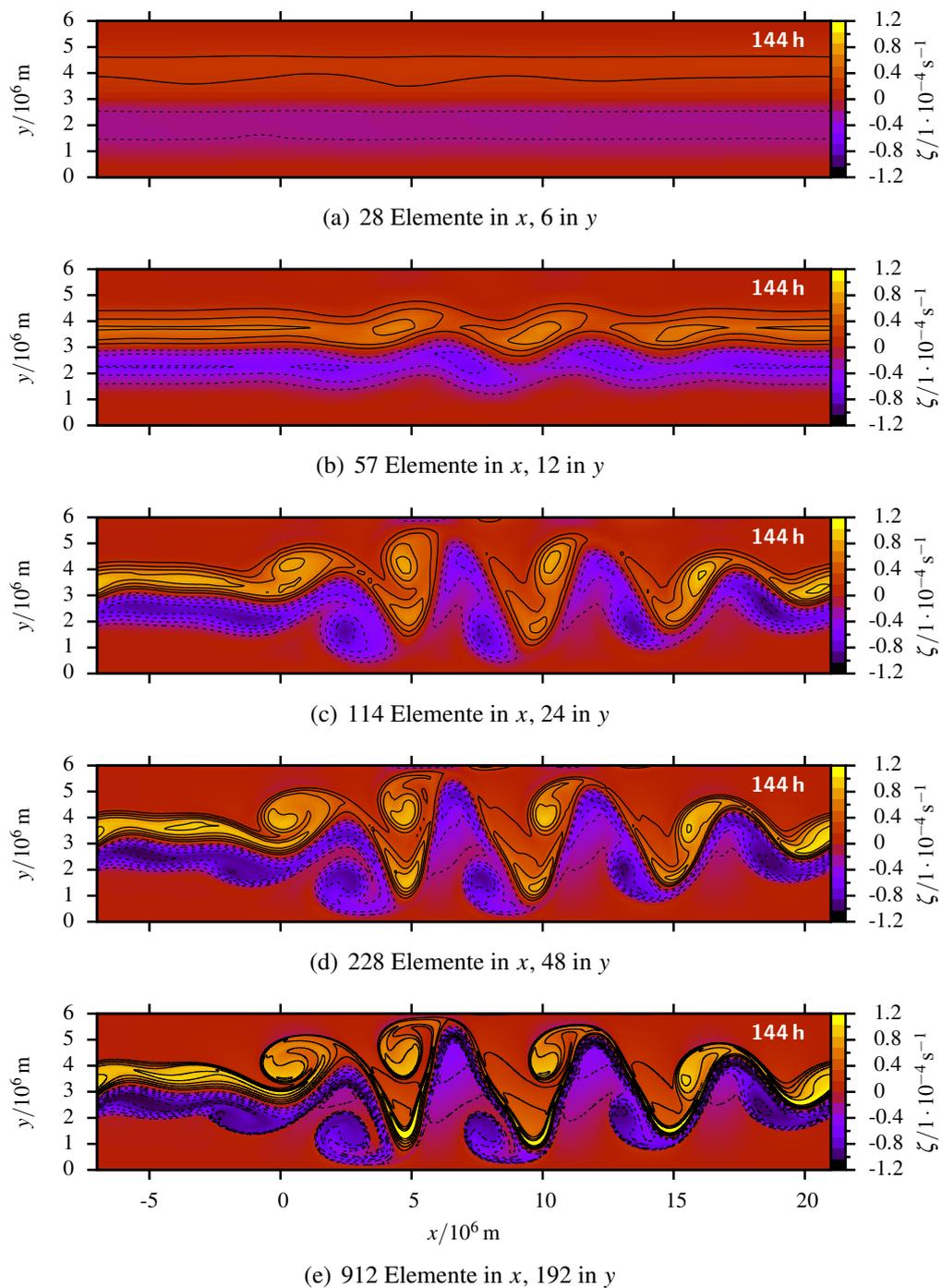


Abbildung 6.10.: Galewsky-Testfall, Konvergenz in steigender Auflösung, Vorticity nach 144 h (vergleiche auch entsprechendes Bild von mit 456 Elementen in x und 96 in y in Abb. 6.8), Konturintervall $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

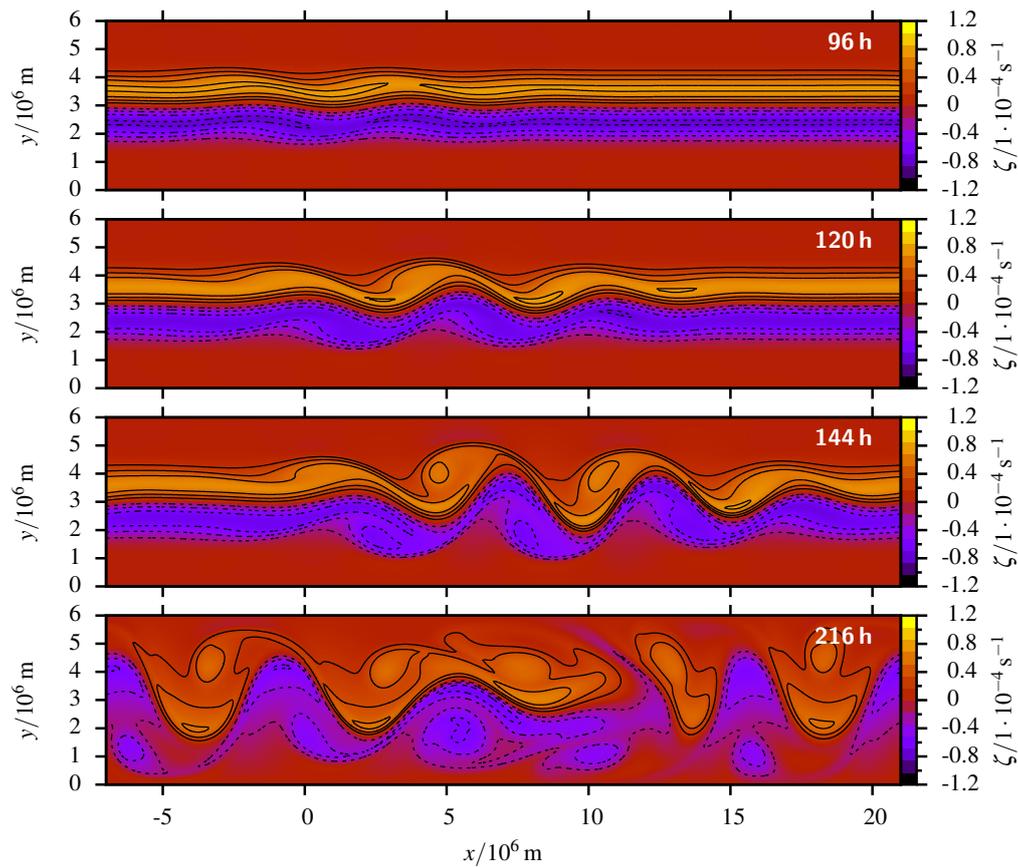


Abbildung 6.11.: Galewsky-Testfall, Vergleich mit Diffusionskoeffizient $\mu = 1 \cdot 10^5 \text{ m}^2/\text{s}$; von oben nach unten Vorticity nach 96, 122 und 144 h für den Vergleich mit Galewsky et al. (2004, Abb. 6), dazu noch weitere Ansicht nach 216 h, Konturintervall $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

7. Atmosphärische Instabilitäten in mittleren Breiten

Für die Modellierung von Instabilitäten in mittleren Breiten kommt das Euler-Gleichungssystem in drei Dimensionen zum Einsatz. Die in Kap. 5 und Kap. 6 individuell geprüften Aspekte des horizontalen und vertikalen Verhaltens werden kombiniert. Die Basis für die folgenden Betrachtungen bildet der zweidimensionale Flachwasserkanal aus Abs. 6.4. Schrittweise erfolgt zuerst der Übergang zu den Euler-Gleichungen und dann der in die dritte Dimension. Nach weiterer Charakterisierung der barotropen Instabilität erfolgt dies in 3D für die barokline Instabilität, zuerst in idealisierter Form mit Bezug auf Stabilitätskriterien. Den Abschluss bilden Simulationen, die einen von barokliner Instabilität dominierten Grundstrom über zwei Jahre verfolgen. In Abhängigkeit von der eingestellten Baroklinität können verschiedene Skalen von Wellenaktivität diagnostiziert werden.

Dieses Kapitel hält sich mit wiederholender theoretischen Beschreibungen der untersuchten Phänomene zurück, dafür sei auf die jeweils angesprochene Standardliteratur verwiesen. Der Fokus liegt auf der Anwendung des in der vorliegenden Arbeit beschriebenen numerischen Modells auf zunehmend realistischere Problemstellungen der Dynamik mittlerer Breiten unter Einsatz der Euler-Gleichungen.

7.1. Barotrope Instabilität mit Euler-Gleichungen in 2D und 3D

Der Testfall von Galewsky et al. (2004) kann auch mit den Euler-Gleichungen berechnet werden. Ein dem geostrophisch balancierten Flachwasserzustand äquivalenter Atmosphärenzustand mit barotropen Wind nach Abs. 4.5, für spätere Erweiterung auf 3D mit isothermer Basisatmosphäre versehen, bildet die Grundlage. Die Störung der Dichte mit vergleichbarer relativer Amplitude (0.01 kg/m^3 bei Basisdichte 1.21 kg/m^3 , siehe auch Übersicht in Tab. 7.1), ergibt sowohl mit dem Flachwasseräquivalent Gl. 2.50 als auch mit den Euler-Gleichungen mit lufttypischem Wert von γ gleichwertige Wellenstruktur, die sich von der in Abb. 6.10(c) nicht nennenswert unterscheidet. Die beiden ersten Darstellungen in Abb. 7.2 belegen dies.

Zur Versicherung, dass die hier präsente Instabilität wirklich barotrope Instabilität beschreibt, wie z.B. von Etling (2008) dargelegt, dient eine abgewandelte Reihe von Simulationen, die zum Erhalt der maximalen Windgradienten den Kanal in der Breite von 6000 km auf 1500 km verringern und dann diese Breite mit verschiedenen Profilen des zonalen Grundstromes ausfüllen. Aus Tab. A.1 stehen dazu zusätzlich zum bisher eingesetzten Quadratsinus, in steigender Folge der Komplexität, konstante, lineare und quadratische Verläufe zur Verfügung. Die Störung wird weiterhin (in der Breite skaliert) auf die Dichte angewendet. Es genügt ein Blick auf die Zeitreihe der auf den Anfangswert bezogenen relativen \mathcal{L}^2 -Differenznorm in Abb. 7.1, um sich zu vergewissern, dass tatsächlich nur das Windprofil mit Wendepunkten (siehe linke Seite von Abb. 7.1) die Instabilität beinhaltet. Daran ändern auch die in die Nähe gerückten reflektiven Ränder nichts.

Das barotrope Modell kann aus der zweidimensionalen Formulierung durch einfaches Setzen von wenigen Parametern in die dritte Dimension erweitert werden. Es kommt eine Dimension in z mit 10 km hinzu und der barotrope Zustand wird nach Abs. 4.5 mit einer

| Eigenschaft | Wert (Erläuterung) |
|-----------------------------|---|
| Dimensionen | 2D (x, y) und 3D (x, y, z) |
| Elemente ($x \times y$) | 114×24 |
| Elemente (z) | 5 |
| Basisgrad k | 1 in alle Richtungen |
| Ausdehnung ($x \times y$) | $28\,000 \text{ km} \times 6000 \text{ km}$ |
| Ausdehnung (z) | 10 km (in 2D: fix $z = 0 \text{ km}$) |
| Randbedingungen | reflektiv in y und z , periodisch in x |
| Basiszustand | barotrop-isotherm |
| Referenzzustand | isotherm ruhend |
| Grundstrom | eingengesetztes Quadratsinusprofil mit Wendepunkten |
| Störung | doppeltes Gauß-Profil in (x, y) , Amplitude 0.01 kg/m^3 in 2D, 1 % in 3D |
| Zeitschritt | 2D: explizit (im Mittel zwischen 26 s und 95 s), 3D: semi-implizit, im Mittel 56 s |
| Simulationsdauer | 9 d |

Tabelle 7.1.: Konfiguration zur barotropen Instabilität

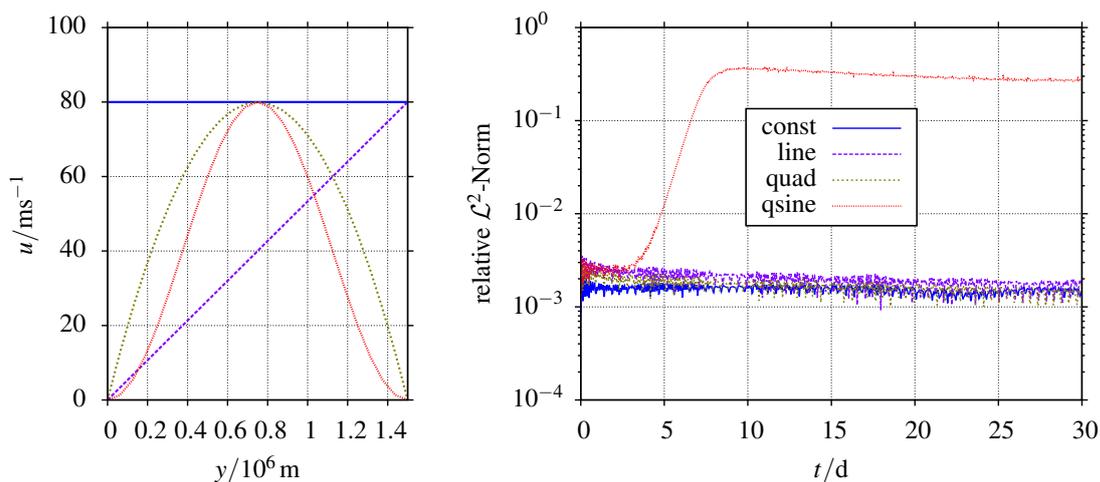


Abbildung 7.1.: Barotrope Instabilität von verschiedenen Windprofilen mit Euler-Gleichungen in 2D; *links*: die verwendeten Profile des zonalen Grundstroms, *rechts*: Zeitreihen der relativen Differenznorm der Impulsverteilung im Unterschied zum Anfangszustand als Indikator für ausbrechende Instabilität

isothermen Vertikalstruktur fortgesetzt. Eine Wahl der vertikalen Konstanz der Temperatur bedingt nach Gl. 4.36 direkt die globale Konstanz. Somit ist Temperaturadvektion, welche Baroklinitäten verursachen könnte, ausgeschlossen. Die Störung ist für die Läufe in 3D relativ zum ortsabhängigen Basiswert der Dichte definiert, so dass auch in hohen Lagen die Größenordnung dieser bei maximal 1 % liegt.

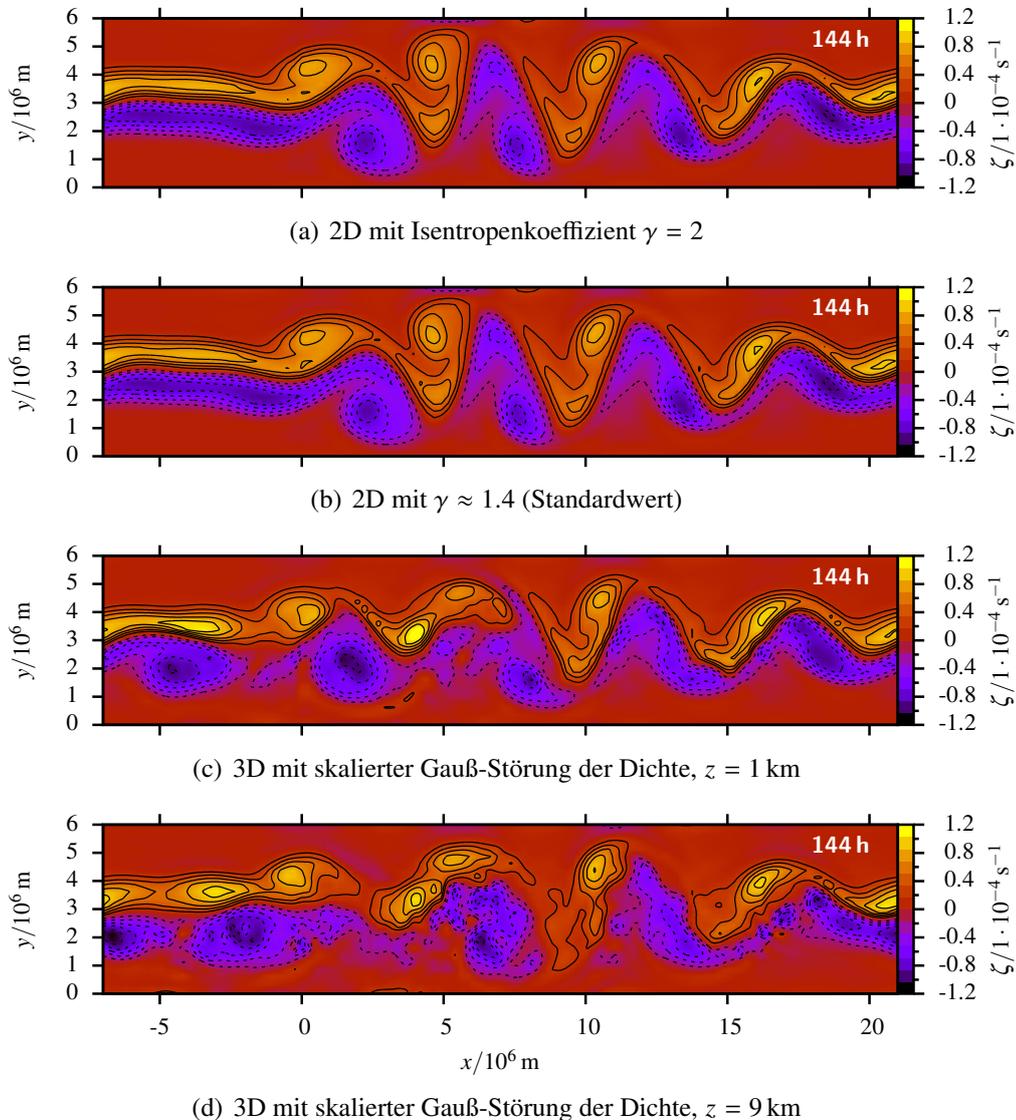


Abbildung 7.2.: Barotrope Instabilität in 2D und 3D mit Euler-Gleichungen, Vorticity nach 144 h für verschiedene Modellkonfigurationen, Konturintervall $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

Eine Verifikation des Modells ist folglich die Erhaltung barotroper Strukturen, welche einfach durch den Vergleich verschiedener Schichten, beispielhaft in Bodennähe und in Nähe des Oberrandes, diagnostiziert werden kann. In den Darstellungen aus 3D-Läufen in Abb. 7.2 zeigt sich die weitgehende vertikale Gleichschaltung der Vorticity-Entwicklung bei lokalisierter regelmäßiger Störung wie in Abs. 6.4. Aber auch bei Störung mit gleichverteiltem Rauschen, welches anfänglich keine Korrelation zwischen den Schichten aufweist, bleiben die Vorticity-Strukturen barotrop (Abb. 7.3). Es ist eine weitere Bestätigung der Modellphysik, dass die sich entwickelnden Wellenlängen in Abb. 7.2 nicht von der Art der Störung abhängen.

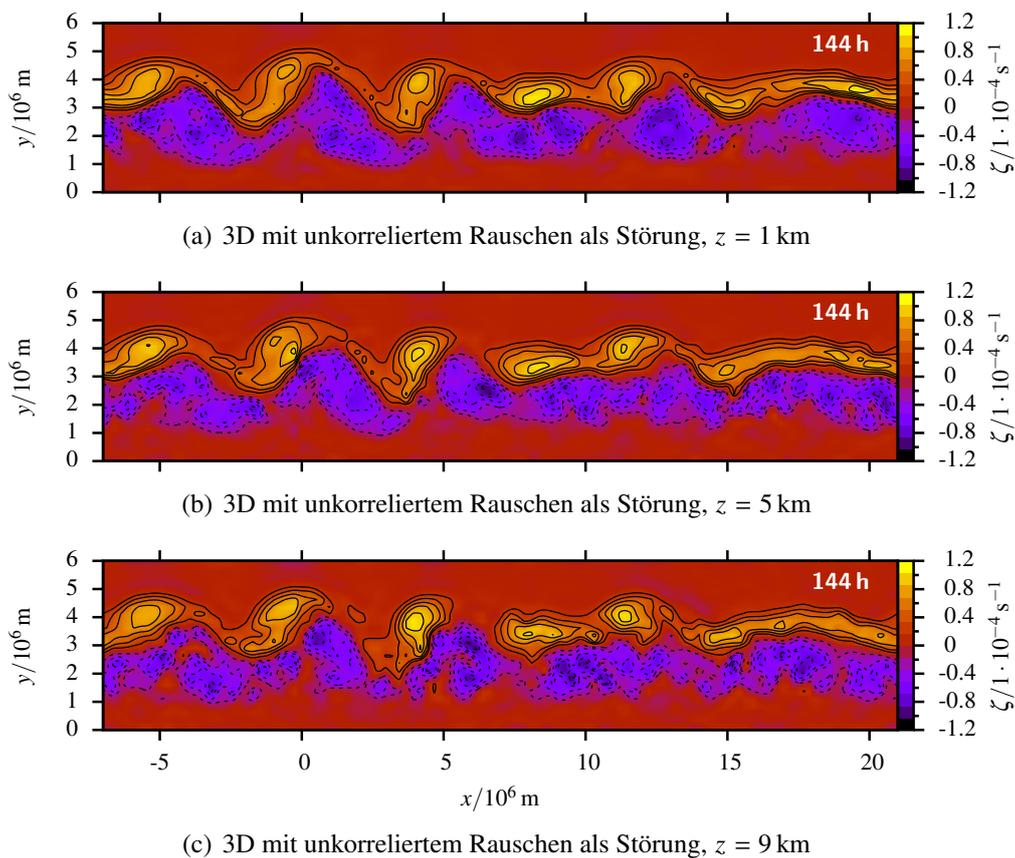


Abbildung 7.3.: Barotrope Instabilität in 3D mit Euler-Gleichungen, Rauschen als Störung, Vorticity nach 144 h für verschiedene Höhen, Konturintervall $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

7.1.1. Wavelet-Spektrum

Gerade mit Blick auf späteren Vergleich mit baroklinen Atmosphären lohnt es, sich den Verlauf der barotropen Instabilität über eine Zeitreihe der Aktivität verschiedener Wellenlängen zu verdeutlichen. Dies erreicht die etablierte Methode der Wavelet-Analyse, deren Anwendung hier der Darstellung von Torrence und Compe (1998) folgt.¹ Da es hier nur um einen Eindruck der Wellendynamik eines idealisierten Modells geht, wird dabei auf die Kennzeichnung von signifikanten Bereichen verzichtet. Es wurde Software von C. Torrence und G. Compo verwendet, welche unter <http://paos.colorado.edu/research/wavelets/> verfügbar ist.

Als Grundlage für die Wavelet-Analyse einer physikalischen Größe dient eine Zeitreihe dieser an einem ausgewählten Punkt des Modellgebietes. Dieser Punkt sollte hinsichtlich der Wellendynamik repräsentativ für das ganze Gebiet sein, bzw. nicht in einem Bereich liegen, der von der darzustellenden Dynamik nicht erfasst wird oder diese z.B. am Modellrand nur verfälscht erfährt. Die Wahl eines solchen Punktes wäre besonders problematisch, handelte es sich um statische Strukturen mit stehenden Wellen. Praktisch wird dies dadurch vermieden, dass aus einer Auswahl von Zeitreihen eine mit repräsentativem Wavelet-Spektrum herausgenommen und dargestellt wird. Die Zeitreihen selbst weisen eine Auflösung von einer Stunde auf.

Zur Vorauswahl kommen im Gebiet mit 114 mal 24 Elementen in der Horizontalen Punkte in der Mitte der Elemente 21, 62, 103 in x und 6, 12 und 18 in y (jeweils 1/4,

¹ Zur Definition der Wavelet-Transformation siehe Abs. A.3.

1/2 und 3/4 Teilung der Breite). Es zeigt sich, dass die Punkte für verschiedene x in der Kanalmitte im Spektrum äquivalent zueinander sind und die Punkte näher zum Rand tendenziell Schwächungen sowohl im hochfrequenten als auch niederfrequenten Bereich zeigen. Somit kann der Mittelpunkt des Elementes 62 in x und 12 in y , nahe, aber nicht gleich dem geographischen Mittelpunkt des Gebietes (welcher auf einer Kante zwischen Elementen liegt) als repräsentativ für die anzutreffende Dynamik gewählt werden.

Die Darstellungen in Abb. 7.4 geben einen Eindruck der barotropen Dynamik im zwei-dimensionalen Modell mit den Euler-Gleichungen auf Basis der Zeitreihe des Druckes am gewählten Punkt über zwei Jahre Simulationszeit.

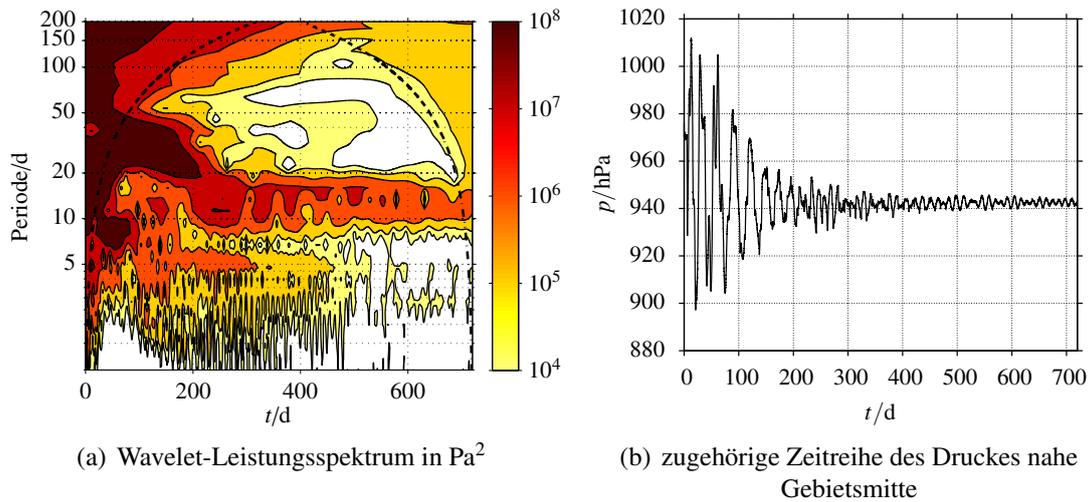


Abbildung 7.4.: Wavelet-Leistungsspektrum der barotropen Instabilität (logarithmische Farbskala, gestrichelte Grenze zum kritischen Randbereich, innerhalb dessen die Zeitreihe zu kurz für die betreffenden Perioden ist) und die Druck-Zeitreihe dazu (in der Nähe der Kanalmitte)

Deutlich im Spektrum und auch in der Zeitreihe in Abb. 7.4 ist die starke Dynamik in den ersten 200 Tagen zu erkennen, mit dominanten Wellen auf Monatsskala bzw. innerhalb der ersten 100 Tage auch auf Wochenskala. Neben gewisser Aktivität im Bereich um und unter fünf Tagen ist ab 200 Tagen die Dynamik geprägt von Wellen mit Perioden zwischen 10 und 20 Tagen. Bei Betrachtung des Spektrums sollte die logarithmische Skalierung nicht vergessen werden. Die Wellenenergie unter zehn Tagen Periode liegt also um Größenordnungen unter der mit Perioden um zwei Wochen.

7.2. Barokline Instabilität in Abhängigkeit von statischer Stabilität und thermischem Wind

Barokline Instabilität ist fundamental als Treiber der Wettersysteme, welche die für den Menschen erfahrbare atmosphärische Dynamik bestimmen. Ein Atmosphärenmodell auf globaler Skala muss barokline Instabilität abbilden können. Kern dieser ist vertikale Windscherung in Relation mit der Stabilität der Schichtung. Mit genügend starker Scherung, d.h. thermischem Wind zwischen Schichten, birgt auch eine stabil geschichtete Atmosphäre das Potenzial, aus einem Grundstrom im Gleichgewicht durch kleine Störung reichhaltige Dynamik, insbesondere unter Beteiligung zyklonaler Strukturen, zu entfalten.

Eine vereinfachte Behandlung barokliner Instabilität mit einem Zwei-Schichten-Modell ist Bestandteil der Standardliteratur, so auch bei Etling (2008) zu finden. Weiterführend

beschäftigt sich Vallis (2006) neben anderen Mechanismen ausführlich mit barokliner Instabilität in Ozean und Atmosphäre, ausgehend vom klassischen Eady-Problem, welches einen Grundstrom mit vertikaler Scherung in kartesischen Koordinaten und mit reflektivem oberem Rand betrachtet. Diese von Eady (1949) formulierte Konfiguration kann auf den hier betrachteten β -Kanal übertragen werden. Vereinfachungen des Gleichungssystems (Inkompressibilität des Fluides) unterbleiben und auch entspricht die Schichtung in folgenden Betrachtungen nicht konstanter Stabilität sondern ist durch eine einfache polytrope Atmosphäre gegeben.

Erster Vergleichspunkt ist das Stabilitätsdiagramm aus Analyse des Zwei-Schichten-Modells durch Etling (2008, Bild 14.7). Es gilt in einem praktischen Ansatz, barokline Instabilität in Abhängigkeit der bestimmenden Parameter des Grundzustandes zu diagnostizieren. Ziel ist neben einer mit der Theorie zu vergleichenden Stabilitätskarte auch der Vergleich der Dynamik mit dem linearen (Gl. 2.47) und dem nichtlinearen (Gl. 2.39) Gleichungssystem. Die Basiskonfiguration dieser Simulationsserie ist zur Übersicht in Tab. 7.2 zusammengefasst.

| Eigenschaft | Wert (Erläuterung) |
|-----------------------------|--|
| Dimensionen | 3D (x, y, z) |
| Elemente | $4 \times 4 \times 2$ |
| Basisgrad k | 1 (alle Richtungen) |
| Ausdehnung ($y \times z$) | 6000 km \times 10 km |
| Ausdehnung in x | gleich Anregungswellenlänge L |
| Randbedingungen | reflektiv in y und z , periodisch in x |
| Basiszustand | geostrophisch polytrop (Abs. 4.4) |
| Referenzzustand | identisch |
| Grundstrom | $\partial_z u$ global und u horizontal konstant |
| Störung | Dichte, Sinusprofil mit Amplitude 0.1 % in x und Wellenlänge L , in y und z konstant |
| Zeitschritt | semi-implizit, abhängig von L und Windmaximum nach Abs. 3.2.4 |
| Simulationsdauer | 3 d |

Tabelle 7.2.: Konfiguration zur baroklinen Instabilität

Grundzustand ist ein geostrophisch balancierter Anfangszustand nach Abs. 4.4, der auf einfach polytroper Schichtung (Abs. B.2.2) einen horizontal konstanten Zonalstrom mit konstanter vertikaler Scherung, also konstantem thermischen Wind $\partial_z u$, vorgibt. Nach Abs. 4.4.3 gilt die in der Kanalmitte vorgegebene Temperaturschichtung für das gesamte Volumen und ist insbesondere auch unabhängig von der Stärke des thermischen Windes. Damit ergeben sich auch die Schichtungsstabilitäten, für den Vergleich genügend ausgedrückt durch den näherungsweise konstanten Gradienten der potentiellen Temperatur in Tab. 7.3. Beide Formulierungen — lineare und nichtlineare Gleichungen — nutzen dabei den baroklinen Gleichgewichtszustand als Referenz, so dass auch mit geringer Auflösung lediglich die aufgeprägte Störung Dynamik verursacht und eine Diagnose des Anwachsens einer kleinen Störung innerhalb von drei Tagen Modelllaufzeit überhaupt möglich ist. Ohne komplettes geostrophisches Referenzfeld würden die Diskretisierungsstörungen des Gleichgewichtes dominieren.

Das Grundexperiment beginnt dabei mit $u = 0$ ab Boden, wobei es auch einen Vergleich mit konstant gehaltenem mittleren Wind gibt, um reine Skalierungseffekte mit der im System enthaltenen kinetischen Energie auszuschließen.

| | sehr stabil | stabil | nahe labil |
|-------------------------------------|-------------|--------|------------|
| $\partial_z T / (\text{K/km})$ | -4 | -6.5 | -9 |
| $\partial_z \theta / (\text{K/km})$ | 7 | 4 | 1 |

Tabelle 7.3.: Stärke der Schichtungsstabilität im Begriff des näherungsweise für das Modellgebiet geltenden Gradienten der potentiellen Temperatur $\partial_z \theta$ in Zuordnung zum vorgegebenen polytropen Temperaturgradienten $\partial_z T$

Die räumliche Struktur besteht in dem β -Kanalmodell mit 6000 km Breite und 10 km Höhe, wobei aber die Länge in x entsprechend der zu untersuchenden Wellenlänge gestaucht wird — siehe Schema in Abb. 7.5(a).² Aus praktischen Erwägungen ist die horizontale Auflösung jeweils so gewählt, dass die betrachtete Welle sicher dargestellt werden kann. Dies geschieht durch vier Elemente mit $k = 1$ in x und y . Zwei Elemente in jede Richtung reichen zwar zur stetigen Darstellung einer Welle — zur unstetigen Andeutung einer Wellenstörung sind nach Shannon (1949) prinzipiell sogar die zwei Stützpunkte eines linearen Elementes ausreichend —, zeigen aber in der Simulation keine diagnostizierbare Instabilität. Die Störung selbst bezieht sich allein auf Wellen in zonaler Richtung. Sie ist eine Modifikation der Dichte um 0.1 % mit einem Sinusprofil in x , konstant in y (Abb. 7.5(b)). Vertikal kommen anfangs lediglich zwei Elemente zum Einsatz. Exemplarisch kommen auch Variationen der vertikalen Auflösung durch Erhöhung der Elementzahl und auch Verringerung der Gebietshöhe vor.

Da mit vier horizontalen Elementen auch kleinere Wellenlängen als die angeregte darstellbar sind, kann sich die folgend analysierte Instabilität letztlich auch durch das tatsächliche Anwachsen kleinerer Wellenlängen ergeben, ohnehin durch eine Verstärkung der lokalen Gradienten, welche in einem feiner aufgelösten Modell zugunsten kleinerer Wellenlängen reduziert wären. Die Stabilitätskarten enthalten keine Analyse der dominanten Moden, sie bieten lediglich eine Aussage darüber, wie instabil das Modell bei Anregung einer bestimmten Wellenlänge reagiert, ohne Mechanismen des Transfers der Energie auf kleinere Skalen auszuschließen.

Eine zukünftige Erweiterung dieses Experimentes könnte sich mit erhöhter horizontaler

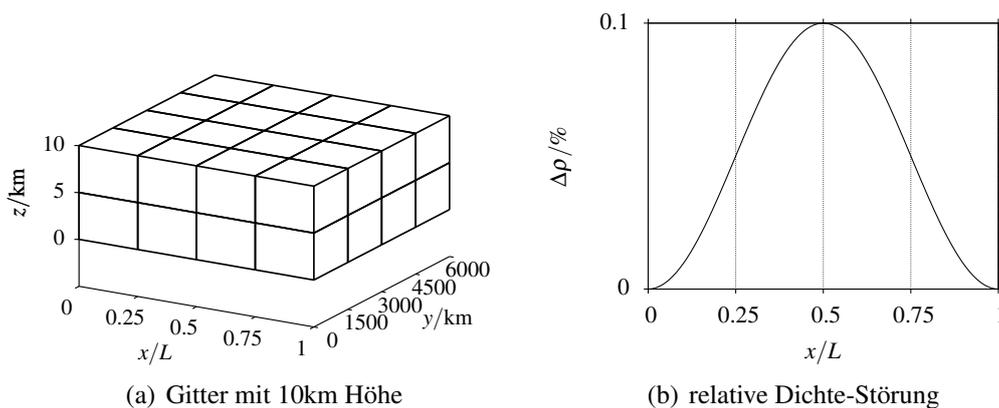


Abbildung 7.5.: Schema der Modellkonfiguration zur baroklinen Instabilität mit 10 km Höhe und zwei Elementen in z , Gitter und Dichte-Störung, jeweils mit Andeutung der Skalierung der Kanallänge mit der angeregten Wellenlänge L

² Störung mit mehreren Perioden im Kanal voller Länge erzielt keine weitere Information, da das Modell bei völlig periodischem Anfangszustand periodisch bleibt. Für Anregungen in Verbindung mit Rauschen wäre dies anders.

Auflösung und auch einem zu den Rändern verschwindendes Zonalwindprofil von den naheliegenden Beschränkungen des einfachen Ansatzes lösen und die Stabilitätsanalyse mit einem Wellenfilter versehen, um auch wirklich Aussagen über die relevanten wachsenden Wellen zu gewinnen. Das eingeschränkte Experiment hat trotzdem seine Berechtigung, da es minimale Bedingungen für das Auftreten von nennenswerten baroklinen Instabilitäten umreißt.

Der Ansatz mit minimaler Auflösung erlaubt die Durchführung vieler einzelner Simulationen, welche die Entwicklung der Störung über drei Tage verfolgen. Für die Abtastung der Parameterkarte in vertikaler Windscherung $\partial_z u$ mit Schrittweite $1 \text{ m s}^{-1} \text{ km}^{-1}$ von $0 \text{ m s}^{-1} \text{ km}^{-1}$ bis $16 \text{ m s}^{-1} \text{ km}^{-1}$ und Störungswellenlänge L mit Schrittweite 125 km von 0 km (keine Störung) bis 9000 km sind dies 1241 Simulationsläufe für eine Konfiguration. Wie schon festgestellt, ist die Temperaturschichtung konstant und damit die statische Stabilität des Anfangszustandes weitgehend unabhängig vom eingestellten thermischen Wind. Die begrenzte Auflösung beschränkt die darstellbare Wellendynamik auf die angeregte Wellenlänge und kleinere, die weniger gut bzw. gar nicht aufgelöst werden (Subgridscale).

Als Maß für die Instabilität dient der Anstieg einer logarithmischen Anpassung der Zeitreihe der relativen \mathcal{L}^2 -Differenznorm in der Dichte, verglichen zum ungestörten Anfangszustand. Dies ist gedacht als ein Analogon zur „Eady growth rate“ (Eady, 1949). Beispielhaft sind diese Zeitreihen für eine Wellenlänge und verschiedene thermische Winde in Abb. 7.6 dargestellt. Es ist klar erkennbar, dass diese Anpassung an das Ideal eines exponentiellen Anstiegs mit deutlichem Fehler behaftet ist. Wichtig ist hier aber nicht der exakte Zahlenwert des Exponenten, sondern ein mit der Instabilität positiv korreliertes Maß zum Vergleich zwischen Läufen. Daher wird auch auf Betonung der allen Darstellungen des Exponenten gemeinsamen physikalische Einheit von d^{-1} verzichtet. Bei den zu erstellenden Stabilitätskarten ist folglich auch die Form der Konturen bzw. Gradienten von Interesse, weniger die absoluten Werte. Ebenso ist die Grenze zwischen Stabilität und Instabilität bestimmter Wellen nicht scharf definiert, aber es können Aussagen über das Verhältnis der Instabilität zweier Anregungswellenlängen gemacht werden.

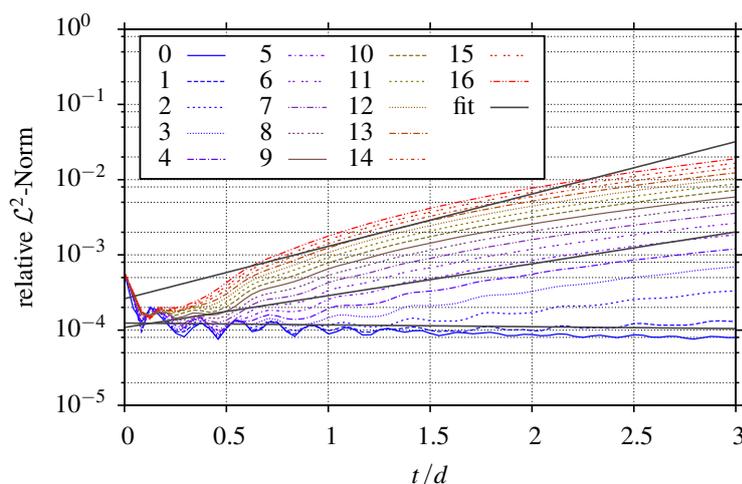


Abbildung 7.6.: Beispielhafte Zeitreihen der Störung der Dichte für barokline Sensitivitätsstudie mit linearem Gleichungssystem, $\partial_z T = -6.5 \text{ K/km}$, $L = 1000 \text{ km}$, Kurven für $\partial_z u \in [1; 16] \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$, dazu logarithmische Anpassung (Fit) für $\partial_z u = 16 \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$, $5 \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$ und $1 \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$, Störungswellenlänge 1000 km

7.2.1. Einfluss der statischen Stabilität

Die Übersicht der Stabilitätsdiagramme der Basiskonfiguration mit $4 \times 4 \times 2$ Elementen, Abb. 7.7, zeigt für lineare Euler-Gleichungen (Gl. 2.47) ein qualitativ der linearen Stabilitätsanalyse von Etling (2008, Bild 14.7) entsprechendes Bild. Die Instabilität nimmt mit dem vertikalen Windgradienten zu und zu einem festen Windgradienten gibt es eine instabilste Wellenlänge, mit steiler Flanke zu kürzeren Wellenlängen hin und sanfterem Abfall der Instabilität zu größeren Wellenlängen.

Eine scharfe Abgrenzung einer minimalen instabilen Wellenlänge ist nicht sichtbar, jedoch ist vom Maximum der Instabilität zu kleineren Wellenlängen hin je nach Schichtung eine Abnahme der Instabilität zu beobachten. Im Spektrum der Exponenten des Störungswachstums ist ein definitiver Punkt aus kritischem thermischen Wind bei kritischer Wellenlänge nicht festzulegen. Es ist zu beachten, dass die Konfiguration mit zwei Elementen in der Höhe nicht mit dem Ansatz eines Zwei-Schichten-Modells identisch ist. Durch die lineare Darstellung innerhalb eines Elementes hat das DG-Modell vier Freiheitsgrade in der Höhe, was einem Vier-Schichten-Modell entspräche.

Zum Zweck des Vergleiches mit Etling (2008) wurde die Kontur bei Exponentwert 0.8 als kritische Trennlinie willkürlich festgelegt. Die relative Verschiebung dieser Linie liefert einen Anhaltspunkt für den Vergleich der verschiedenen Konfigurationen. Für die Schichtung mit mittlerem atmosphärischen Wert von $\partial_z T = -6.5$ K/km, welcher mit einem positiven Gradienten der potentiellen Temperatur von ca. $\partial_z \theta \approx 4$ K/km einhergeht, ergibt diese Grenzziehung einen kritischen thermischen Wind von etwa $4 \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$ und eine kritische Wellenlänge nahe 2000 km. Für die stabiler geschichtete Atmosphäre mit $\partial_z T = -4$ K/km bzw. $\partial_z \theta \approx 7$ K/km liegt der kritische thermische Wind bei $4.5 \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$ und eine leichte Verschiebung zu höherer Wellenlänge deutet sich an, ist aber hauptsächlich an der Flanke zu kleineren Wellenlängen hin zu erkennen. Klarer ist der Unterschied bei reduzierter Stabilität der Schichtung mit $\partial_z T = -9$ K/km bzw. $\partial_z \theta \approx 1$ K/km. Hier sinkt der markierte thermische Wind auf $2 \text{ ms}^{-1} \text{ km}^{-1}$ und die zugehörige Wellenlänge ist unter 1000 km.

Die Simulation mit dem nichtlinearen Gleichungssystem (Gl. 2.39), an Seite des linearen Gleichungssystems in Abb. 7.7 einbezogen, folgt ähnlicher Struktur mit höheren Maximalwerten der Instabilität, zeigt jedoch, neben einem angedeuteten lokalen Minimum für mittlere Wellenlängen (einer Aufspaltung in zwei Instabilitätsgebiete), eine auffällige Stabilisierung von Anregungen mit Wellen unter 1000 km bzw. unter 250 km für die schwach stabile Atmosphäre. Partiiell erhöhte Instabilität ist durchaus erwartet, aber in der Unterdrückung von Instabilitäten durch Nichtlinearitäten besteht ein bemerkenswerter Effekt. Für diese Detailstruktur fehlt die Begründung in der theoretischen Stabilitätsanalyse, welche von Linearisierungen ausgeht. Es ist auch nicht sichergestellt, dass dieses Verhalten kein Artefakt der gewählten Modellkonfiguration ist. Die Strukturen sind aber auch in Bezug auf die Variation der Stabilität konsistent mit der Verkleinerung des stabilisierten Bereiches für weniger stabile Schichtung.

Die Tendenz der Sensitivität bezüglich der Schichtung sowie im einzelnen der Verlauf des Instabilitätenwachstums mit steigendem thermischen Wind sowie veränderlicher Anregungswellenlänge stimmt mit der Theorie des Zwei-Schichten-Modells aus Etling (2008) überein. Insgesamt sind aber hier kleinere Wellenlängen instabil und eine wirkliche Stufe mit einer minimalen Wellenlänge ist für lineare Euler-Gleichungen nicht zu erkennen.

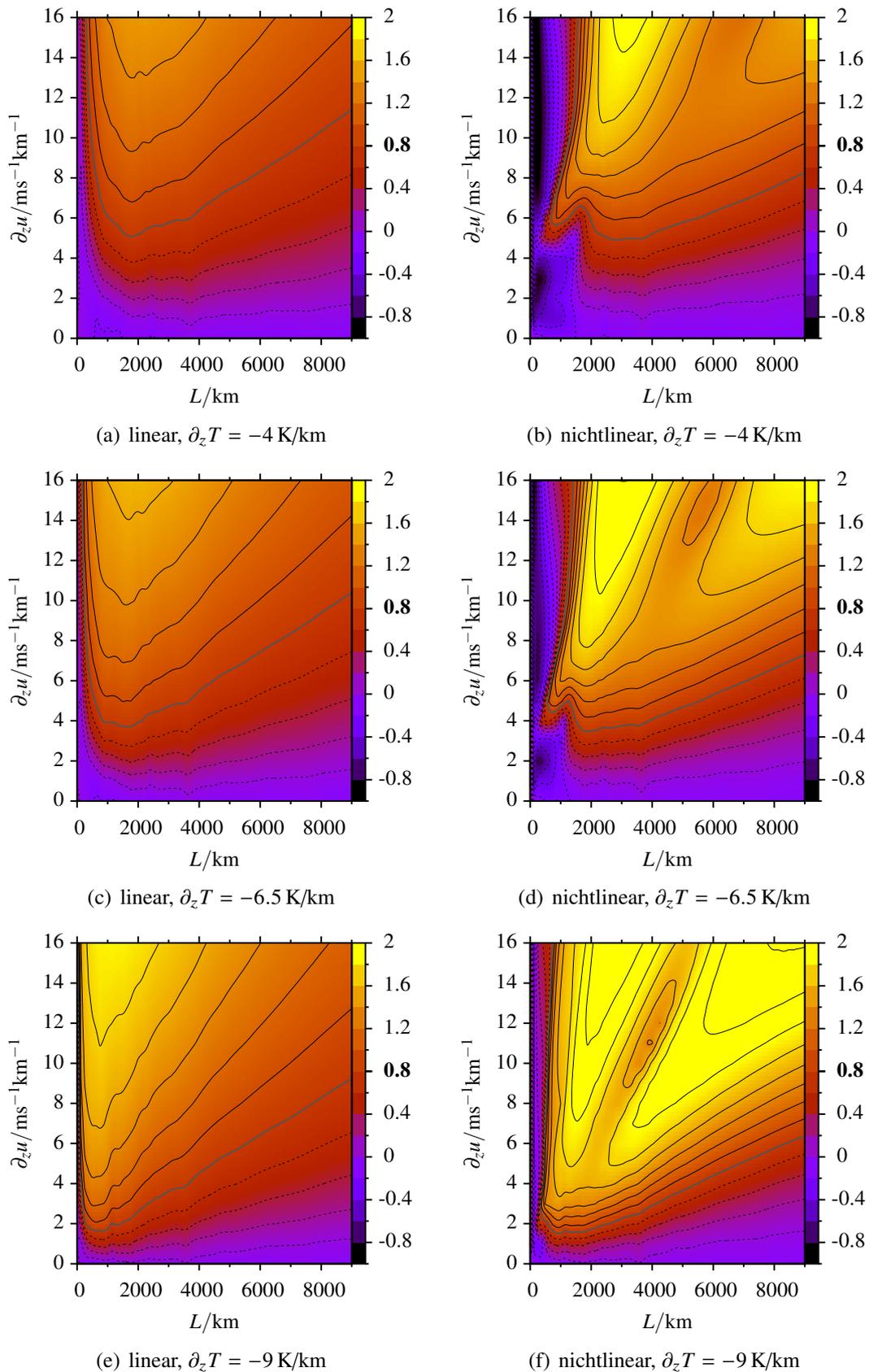


Abbildung 7.7.: Parameterkarten der baroklinen Instabilität mit genähertem Exponenten des Störungswachstums, Läufe mit 2 Elementen in z (10 km) für lineares und nichtlineares Gleichungssystem mit verschiedenen Schichtungen von $\partial_z T = -4$ K/km (sehr stabil) bis -9 K/km (nahe labil); Kontur für 0.8 grau und etwas dicker, jene darunter gestrichelt

7.2.2. Einfluss der vertikalen Diskretisierung

Die Frage des Übergangs zum kontinuierlichen Modell kann mit zusätzlichen Simulationen mit erhöhter vertikaler Auflösung verfolgt werden. Eine mögliche Auftrennung ist die zwischen Verfeinerung der vertikalen Auflösung unter Beibehaltung der Elementzahl durch Reduktion der Modellhöhe und Erhöhung der Elementzahl bei Beibehaltung der Höhe. Die Auflösung selbst erlaubt verschiedene vertikale Moden, aber bei minimaler Elementzahl jeweils nur eine. Erhöhte Elementzahlen ermöglichen dem Modell die Darstellung verschiedener Skalen in der Vertikalen, somit auch eine Tiefenstruktur der Instabilität (siehe flache und tiefe Moden bei Vallis (2006)).

Die drei Konfigurationen von Abb. 7.8 sind dazu im Vergleich mit der mittleren Reihe von Abb. 7.7 zu betrachten. Bei Schichtung $\partial_z T = -6.5 \text{ K/km}$ wird die vertikale Struktur variiert:

- Zuerst Erhöhung der Auflösung auf 10 Elemente (Abb. 7.8(a) und Abb. 7.8(b)), dann
- Reduktion der Höhe unter Beibehaltung dieser Auflösung (5 km mit fünf Elementen, Abb. 7.8(c) und Abb. 7.8(d)) und schlussendlich
- diese reduzierte Höhe mit zwei Elementen aufgelöst, also Halbierung der Höhe im Vergleich zu Abb. 7.7 unter Beibehaltung der Zahl der darstellbaren vertikalen Moden (Abb. 7.8(e) und Abb. 7.8(f)).

Für lineare Euler-Gleichungen verstärkt die Verfeinerung der Auflösung die vorhandene Instabilität, ohne die Verläufe qualitativ zu verändern. Allerdings wird der stabilisierte kurzwellige Bereich zurückgedrängt, bzw. ist kaum mehr als solcher zu identifizieren. Dies entspricht einer Näherung des kontinuierlichen Falls, der bei Vallis (2006, Abb. 6.19) keinen stabilen kurzwelligen Bereich aufweist. Unabhängig davon beeinflusst die Reduktion der Modellhöhe (folglich auch unter Reduktion des maximalen Windes, was als Ursache noch auszuschließen ist) offensichtlich die Stabilität von längeren Wellen. Die Abweichung vom Startzustand aus der Anregung dieser steigt in flacherer Atmosphäre langsamer.

Diese Analyse für das lineare Gleichungssystem wird zusammengefasst durch die Zusammenstellung der Isolinien für den Störungsexponent 0.8 in Abb. 7.9 (ergänzt um eine Kurve für eine von zwei Elementen aufgelöste Modellhöhe von 2 km sowie eine mit fünf Elementen aufgelöste Höhe von 10 km). Der Übergang von 10 km Höhe mit zwei Schichten zur Auflösung derselben Höhe mit zehn Schichten zeigt die generelle Verschiebung der Isolinie zu kleineren thermischen Winden und auch praktisch hin zu Wellenlänge 0 km, welche in dieser Rechnung als nicht vorhandene Störung definiert ist und somit ein eventuell diagnostizierter Anstieg lediglich ein Artefakt im Bereich der Maschinengenauigkeit ist. Die Isolinie fasst die kleinste gerechnete Wellenlänge von 125 km sicher ein, womit nach diesem Experiment die kleinsten messbaren Wellenlängen ab gewissem thermischen Wind instabil sind.

Der Übergang von dieser hohen Auflösung in 10 km zu zwei Schichten in 2 km erhält die Feinheit der Auflösung und zeigt so den reinen Effekt der Höhenreduktion, welcher besonders in der Stabilisierung der langen Wellen besteht (Verschiebung der Linie zu höheren $\partial_z u$), kombiniert mit Verschiebung des Minimums der Isolinie, also des festgelegten kritischen Punktes zu deutlich kleineren Wellenlängen.

Die mittlere Auflösung von 5 km Höhe mit zwei Elementen ordnet sich in die vorher diskutierten Fälle ein. Lange Wellen sind hier stabiler als bei beiden Läufen mit 10 km

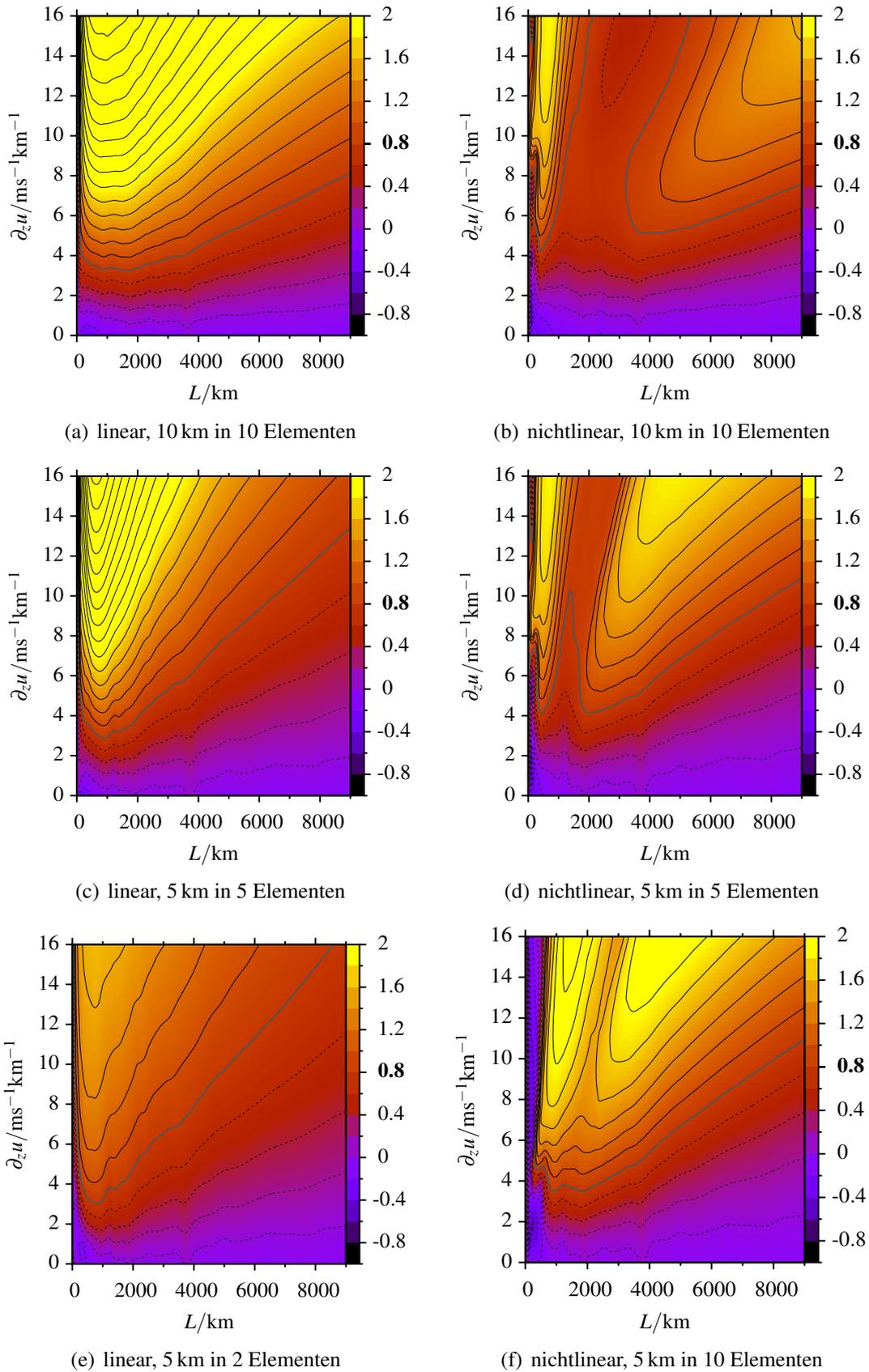


Abbildung 7.8.: Parameterkarten der baroklinen Instabilität mit genähertem Exponenten des Störungswachstums, Läufe in verschiedenen vertikalen Konfigurationen für $\partial_z T = -6.5 \text{ K/km}$ sowie lineare und nichtlineare Euler-Gleichungen; Kontur für 0.8 grau und etwas dicker, jene darunter gestrichelt

Höhe aber instabiler als bei 2 km. Der kritische Punkt und auch die Nähe zur Nullwelle liegen ebenfalls zwischen den Extremen.

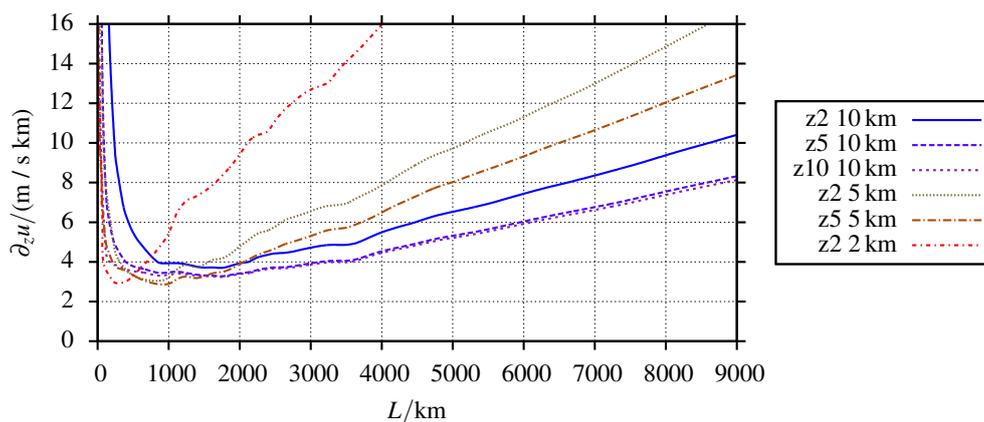


Abbildung 7.9.: Isolinien der baroklinen Instabilität zu Störungsexponent 0.8 im Vergleich für verschiedene vertikale Konfigurationen (z_n für n Elemente in z dazu Modellhöhe in km); lineare Euler-Gleichungen, jeweils vier Elemente in x und y

Für das nichtlineare Gleichungssystem findet eine Verschiebung der Instabilität zu kürzeren Wellen mit der Feinheit der Auflösung gleichermaßen statt, jedoch ist schon an Abb. 7.8 gut zu erkennen, dass die Stärke der Instabilität eher in umgekehrter Richtung skaliert: Mit der feinsten Auflösung ist sie am geringsten, während das lineare Modell die atmosphärische Instabilität gerade bei verfeinerter Auflösung zu überschätzen scheint. Dies deckt sich mit Erfahrungen mit höher aufgelösten Testläufen, die mit dem nichtlinearen Modell über lange Zeit numerisch stabil bleiben, während mit dem linearen Modell ungebremstes Wachstum der Advektionsgeschwindigkeit aus physikalischer Instabilität der Simulation ein Ende setzt.

Eine Bestätigung, dass die hier diagnostizierte Instabilität wirklich mit dem vertikalen Windgradienten und nicht etwa primär mit dem Betrag des Windes selbst zusammenhängt, liefert die Simulation mit einem Startzustand, der auf den vom Boden aus zunehmenden Scherungswind einen Basiswert addiert, so dass der Mittelwert des Windes konstant bei 80 m/s liegt. Das Resultat dieser Rechnung mit dem linearen System in Abb. 7.10 zeigt als Unterschied zum in Abb. 7.7 beinhalteten Diagramm lediglich eine gewisse Stabilisierung durch den zusätzlichen Wind.

In Übereinstimmung mit Eady (1949) skaliert die Instabilität mit dem thermischen Wind, in den fein aufgelösten Darstellungen für 10 km Höhe mit linearen Gleichungen in Abb. 7.8 auch erkennbar linear bei der maximal instabilen Wellenlänge. Eine scharfe Abgrenzung nach einem Kriterium eines minimalen thermischen Windes in Abhängigkeit von Schichtungsstabilität und Coriolisfaktor inklusive seiner linearisierten Ableitung β fehlt. Tatsächlich zeigt eine Wiederholung der Simulationen mit $\beta = 0$ keine nennenswerte Änderung der Stabilitätskarten, welche daher auch nicht dargestellt wurden.

Der zum Zwei-Schichten-Modell analoge Verlauf der Isolinien in Abb. 7.9 ist nicht durch den β -Effekt zu erklären. Vielmehr zeigt sich ein bestimmender Zusammenhang mit der Höhe des reflektierenden oberen Randes (idealisierte Tropopause). Es soll hier nochmals betont sein, dass die Analyse das Wachstum eines globalen Differenzintegrals der Dichteverteilung nach anfänglicher Störung dieser betrifft. Welcher physikalischen Wellenlänge, in mitunter unzureichender diskreter Darstellung, dieses Wachstum zuzurechnen ist, ist nicht genauer untersucht worden. Das recht beschränkte Modell soll hier auch nicht überinterpretiert werden. Die wesentliche Aussage ist eine Bestätigung der Skalierung barokliner Instabilität mit dem thermischen Wind als bestimmende Größe

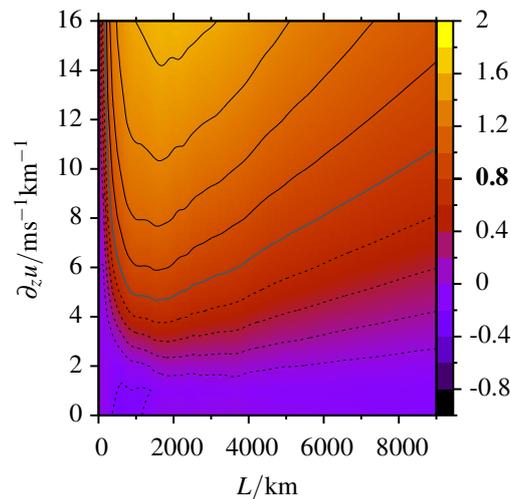


Abbildung 7.10.: Parameterkarte der baroklinen Instabilität mit genähertem Exponent des Störungswachstums, Lauf des linearen Gleichungssystems mit 2 Elementen in z und festgehaltenem Durchschnittswind, Schichtung mit $\partial_z T = -6.5$ K/km; Kontur für 0.8 grau und etwas dicker, jene darunter gestrichelt

eines baroklinen Zustandes nach Abs. 4.4 mit einem Vergleich des Verhaltens des nichtlinearen Gleichungssystems, welches folgend für Studien der Entwicklung verschiedener barokliner Zustände eingesetzt wird.

Es ist eine Erweiterung der Simulationen mit einem weniger trivialen Windprofil denkbar, mit einer über 10 km vergrößerten Modellhöhe oder auch Einsatz einer Absorptionsschicht, um den Einfluss des Oberrandes zu untersuchen. Eine für alle Anregungen konstante horizontale Auflösung, im Gegensatz zu der auf verschiedenen Skalen konstant gehaltenen Elementzahl, könnte eine sicherere Basis für Analysen unter Differenzierung der sich entwickelnden räumlichen Skalen bieten.

7.3. Entstehung zyklonaler Wirbel aus baroklin instabilem Grundstrom

Die markante Ausprägung barokliner Instabilität ist die Entwicklung von Zyklonen aus der Störung eines rein zonalen Grundstromes. Nachdem die Entwicklung einer baroklinen Instabilität anhand globaler Differenzmaße charakterisiert wurde, liegt es nahe, analog zum Testfall der barotropen Instabilität von Galewsky et al. (2004) exemplarisch eine Konfiguration zu ersinnen, die aus dem im Anfangszustand angelegter barokliner Instabilität und einer Störung darauf zyklonale Strukturen generiert.

7.3.1. Konfiguration

Diese Konfiguration, auch zusammengefasst in Tab. 7.4, besteht in einem β -Kanal auf 45° N mit Höhe 5 km, Länge 5000 km und Breite 6000 km. Horizontales Zielgebiet ist das zentrierte Quadrat von 5000 km Kantenlänge, der verbleibende Bereich in y wird durch Absorptionsschichten nach Abs. 3.3.4 eingenommen, welche die Reflexion von Meridionalimpuls an den reflektiven Rändern vermindern. Ebenso ist eine Absorptionsschicht für den Vertikalimpuls am Oberrand konfiguriert. In x sind die Ränder periodisch und es gibt keine Einschränkung des Impulstransportes.

Der Grundstrom besteht aus einem globalen Basiswert von 15 m/s in positive x -Richtung (nach Osten) und addiert darauf einer Kombination von linearem Profil in

| Eigenschaft | Wert (Erläuterung) |
|--------------------------------------|--|
| Dimensionen | 3D (x, y, z) |
| Elemente | $200 \times 240 \times 2$ |
| Basisgrad k | 1 (alle Richtungen) |
| Ausdehnung ($x \times y \times z$) | $5000 \text{ km} \times 6000 \text{ km} \times 5 \text{ km}$ |
| Randbedingungen | reflektiv in y und z mit Absorptionsschicht für Normalimpuls (lateral jeweils 500 km, am Oberrand 2.5 km), periodisch in x |
| Basiszustand | geostrophisch polytrop ($\partial_z T \approx 6.5 \text{ K/km}$) |
| Referenzzustand | identisch (ungestört) |
| Grundstrom u | Basis global 15 m/s, darauf linear in z mit $\partial_z u = 6 \text{ ms}^{-1}/\text{km}$ bei $y = 3000 \text{ km}$, Parabelprofil in y |
| Störung | Dichte, „Wellenpaket“: Produkt aus Quadratsinus in x und y (Wellenzahl 1) mit Amplitude 1 %, „Rauschen“: gleichverteiltes Rauschen mit Maximalbetrag 1 % |
| Zeitschritt | semi-implizit, im Mittel ca. 5.5 s für Wellenpaket-Störung, 5.9 s für Rauschen (siehe auch Abb. 3.5) |
| Simulationsdauer | 28 d |

Tabelle 7.4.: Konfiguration zur Wirbelentwicklung

z , in der Kanalmitte ansteigend zu 45 m/s, also mit einem konstanten Gradienten von $\partial_z u = 6 \text{ m/(s km)}$ auf 5 km, und Parabelprofil in y , so dass der Wind an den lateralen Rändern minimal ist. Die größte Baroklinität ist damit auch in der Mitte des Kanals definiert. Nach Abs. 4.4 ist dieser Wind mit einer einfachen polytropen Säule mit $\partial_z T = -6.5 \text{ K/km}$ in der Kanalmitte kombiniert, um in geostrophischer Balance den ungestörten Anfangszustand festzulegen, welcher für die Rechnung mit nichtlinearem Euler-Gleichungssystem (Gl. 2.39) und semi-implizitem Zeitschritt als Referenzzustand dient.

Eine Übersicht des beschriebenen zonalsymmetrischen ungestörten Anfangszustandes bietet Abb. 7.11 mit Ansichten des Zonalwindes, dessen vertikalem Gradienten, Druck und Temperatur, sowie Baroklinität und Vertikalgradient der potentiellen Temperatur.³

Es wird als Systemvariable nur die Abweichung von diesem geostrophischen Zustand betrachtet, was für kurzfristige Rechnungen mit Interesse an der Entwicklung aus diesem heraus angemessen ist. Für Langzeitsimulationen mag ein Referenzzustand in Ruhe oder mit einem dem Langzeitmittel entsprechenden Windprofil effizienter sein.

Die Anregung der Instabilität beginnt mit einer einprozentigen relativen Störung der Massendichte. Die erste Variante dieser ist die einem Wellenpaket mit Dominanz der Skale der Kanallänge entsprechende Störung mit Quadratsinusprofil in x und y . Dieses ist in der Form ähnlich zur Störung in Abs. 6.4, betont aber die größtmögliche Wellenlänge des Kanals. Durch die zweidimensionale Struktur aus der Multiplikation der 1D-Profile ist es allerdings ein Wellenpaket und keine ebene Welle mit isolierter Frequenz. Die zweite Variante, welche auch in den späteren Langzeitläufen eingesetzt wird, ist eine globale Störung mit gleichverteiltem Rauschen mit Amplitude von einem Prozent. Diese Störung betont keine Wellenlänge sondern regt ein breites Spektrum von potentiell instabilen

³ Die Ansichten in Abb. 7.11 stammen nicht direkt aus der vertikal sehr gering aufgelösten Modelldarstellung. Sie nähern die ungestörten analytischen Felder ohne Diskretisierungsfehler.

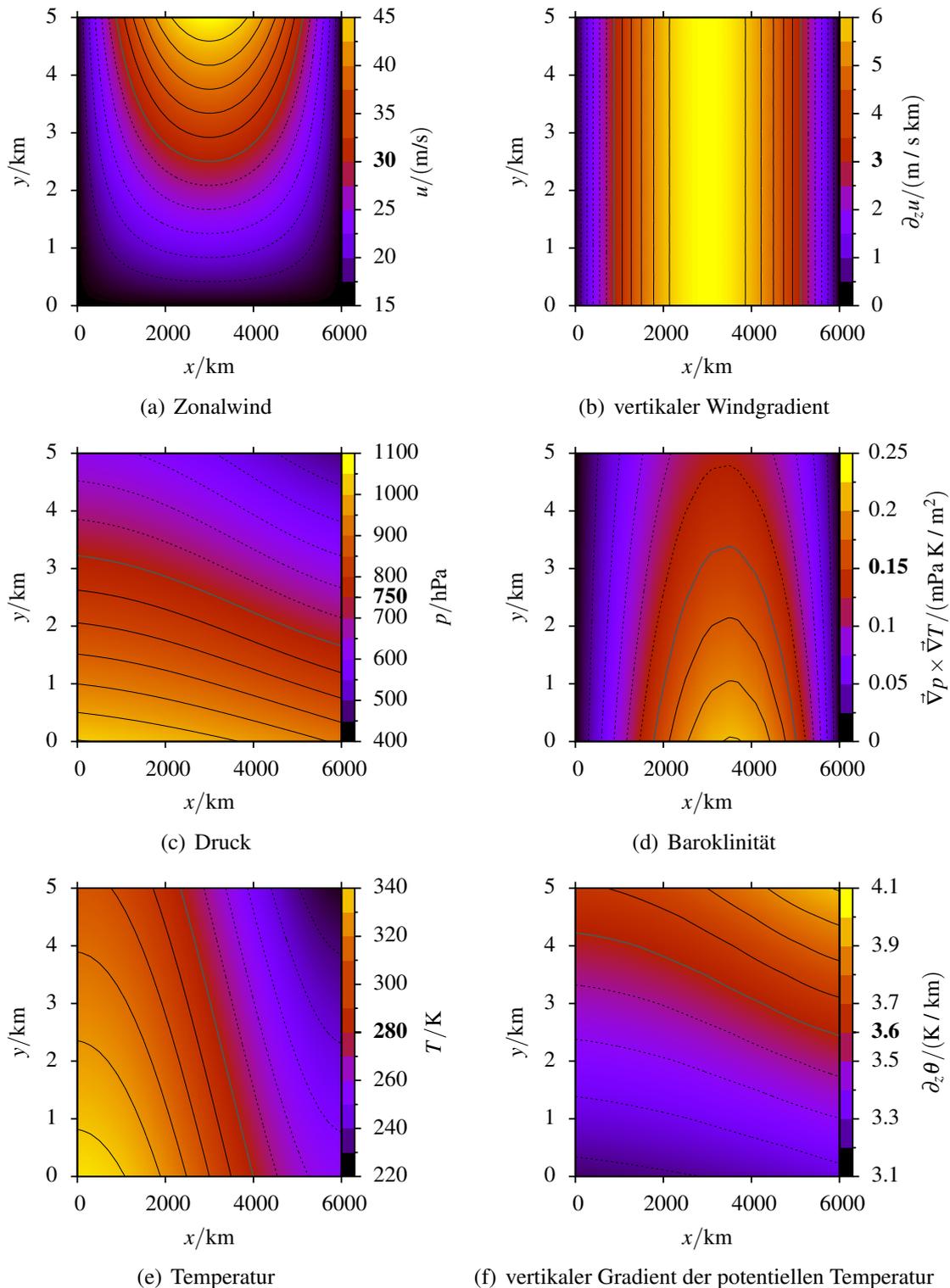


Abbildung 7.11.: Zonalsymmetrischer Anfangszustand zur Wirbelentstehung ohne Störung, jeweils Konturen passend zu Anstrichen auf der Farbskala, mit grauer Zentralkontur beim hervorgehobenen Wert, darunter gestrichelte Konturen

Wellen direkt an.

Es zeigt sich, dass eine vertikale Auflösung von zwei Elementen mit $k = 1$ für dieses Experiment ausreichend ist und auch schon horizontal mit zwölf Elementen in x und entsprechend gleicher Auflösung in y sich für beide Anregungen ein generierter zyklonaler Vortex zeigt. Für die Darstellung der Details wurde eine horizontale Auflösung von 200 Elementen in x und derer 240 in y gewählt, was zwei Freiheitsgrade auf 25 km in beide Richtungen bedeutet. Mit der geringen vertikalen Auflösung ist keine realitätsnahe Dynamik in der Vertikalen zu erwarten, jedoch verdeutlicht dieses idealisierte Experiment dennoch den Mechanismus barokliner Instabilität im Rahmen der Euler-Gleichungen für eine trockene Atmosphäre.

Die Zeitschrittsteuerung zeigt in dieser Konfiguration eine deutliche Wirkung: In Abb. 3.5, welche als Beispiel in Abs. 3.2.4 zu finden ist, ist die Spanne der verwendeten Zeitschritte zwischen 12 s und 3 s offenbar. Dies steht in Relation zur in dieser Konfiguration idealisiert-übertriebenen Dynamik in einer horizontalen Auflösung von 12.5 km, wenn man die zwei Freiheitsgrade pro Richtung und Element einbezieht. Es ist zu beachten, dass diese Zeitschritte aus dem empirischen CFL-Kriterium Gl. 3.52 inklusive einer Skalierung zur Verringerung der Iterationen des impliziten Löser resultieren. Die maximalen stabilen Zeitschritte können deutlich größer sein.

7.3.2. Entwicklung von Impulsdifferenz

Vor der Betrachtung von Horizontalschnitten der Vorticity — auch zum Vergleich mit Abs. 6.4 — lohnt ein Blick auf die Zeitreihe der Impulsstörung⁴ in Abb. 7.12, um sich zu vergewissern, dass beide Fälle die barokline Instabilität auslösen, und zwar mit verschiedener anfänglicher Entwicklung aber ähnlichem Endergebnis.

Die anfängliche Dynamik offenbart einen Unterschied. Während die Wellenpaketstörung nach kurzer Anfangsphase mit Sinken bzw. Stagnation der Abweichung bis ca. $t = 6$ d anscheinend eine dominante instabile Wellenlänge identifiziert hat, welche ideal exponentiellen Anstieg zeigt, ist das Bild für das angeregte Rauschen komplexer. Es gibt mehrere Anstiegsphasen mit anscheinend verschiedenen Exponenten. Nach zehn Tagen haben sich die beiden Läufe in der Impulsdifferenz egalisiert, und zwar bei einem relativen Maß, dass völlige Umverteilung des Impulses anzeigt.

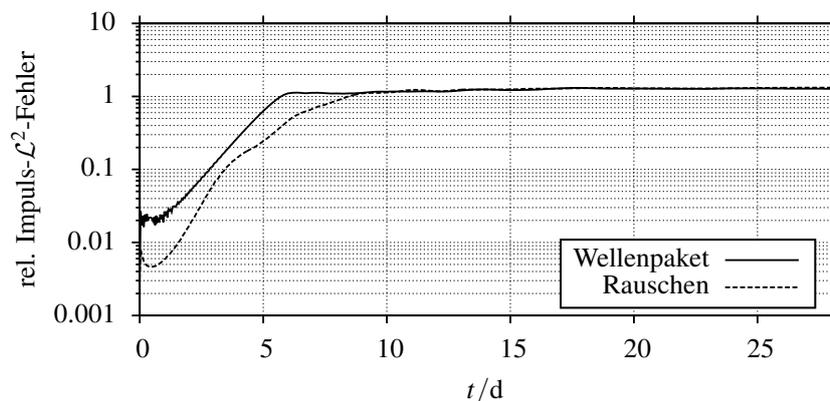


Abbildung 7.12.: Zeitreihen der Impulsstörung zur Wirbelentwicklung mit Wellenpaket-Anregung (Quadratsinus) und Rauschen, einfach logarithmische Darstellung

⁴ Da es hier nicht mehr um das kurzfristige Anwachsen der Störung im Detail geht, ist die Struktur der Strömung als Diagnostik gegenüber der gestörten Dichte bevorzugt.

7.3.3. Vorticity im Horizontalschnitt

Die Ansichten der Vorticity im Schnitt auf 1 km Höhe sind in Abb. 7.13 für wellenpaketartige Anregung sowie für die mit Rauschen in Abb. 7.14 zu finden. Zusätzlich dazu sind im Anhang entsprechende Ansichten auf 4 km Höhe in Abb. C.2 und Abb. C.3 vorhanden. Die Dynamik nahe dem Oberrand des Modellgebietes von 5 km Höhe gleicht qualitativ der nahe dem Boden, zeigt aber anfänglich in unterschiedlich lokalisierten Strukturen die Baroklinität des durch vertikale Windscherung geprägten Anfangszustandes. Nach weitgehendem Abbau dieser durch die ausgebrochene Instabilität ist das Zirkulationsmuster mit dem generierten zyklonalen Vortex eher barotrop und die Strukturen in den verschiedenen Schichten decken sich.

Augenfälligster Unterschied zwischen den verschiedenen Anregungen ist das früh sichtbare Anwachsen von kleinen Skalen beim Rauschen im Gegensatz zu einer (auf diesen 5000 km-Kanal bezogenen) Wellenzahl von eins, die sich bei der Wellenpaketanregung aufbaut. Allerdings zerbricht dort nach 7 d das Frontensystem und kleinskaligere Wirbel entstehen, die in folgender Zeit wieder zu einem zentralen zyklonalen Wirbel zusammewachsen. Die Dynamik aus dem Rauschen ist geradliniger: Sukzessive wächst die Skale der Störungswellen in verschiedenen Stufen, bis sich ein Zentralwirbel herausbildet, der die verbleibenden kleineren in sich vereinigt.

Die Grundstruktur am Ende der Simulation nach einem knappen Monat Modellzeit mit einem durch ein globales Vorticitymaximum gekennzeichneten zentralen Tief (Druckbild in unterer Reihe von Abb. 7.15), ist schließlich unabhängig von der Form der ursprünglichen Störung. Auch weist der dominante Wirbel eine Größe um 1000 km auf, was mit der linearen Stabilitätsanalyse in Abb. 7.9 korreliert: Für die Konfiguration mit zwei Elementen auf 5 km Höhe ist das Maximum des Instabilitätenwachstums bei 1000 km zu erkennen.

Für folgende Langzeitsimulationen bietet sich die unstrukturierte Anregung mit Rauschen an, mit der Sicherheit, dass die Konstruktion einer in einer bestimmten Wellenlänge dominanten Störung nur kurzfristig relevant ist. Die ungeordnete Störung mit dem implizierten Spektrum an Störungswellen ist ohnehin eine deutlich realistischere Annahme als irgendeine analytische Konstruktion.

Auch wenn das spätere Ergebnis sich gleicht, so ist die Dynamik auf dem Weg dahin höchst interessant. Speziell die Formierung scharfer Fronten nach sechs Tagen in Abb. 7.13 sticht ins Auge. Die prägnante Frontenstruktur der Wellenpaketanregung nach $t = 144$ h wird durch Darstellungen von Druck und Temperatur in Abb. 7.15 (Abb. 7.15(a) und Abb. 7.15(b)) untermauert. Insbesondere die Ansicht nach 28 d ((Abb. 7.15(c) und Abb. 7.15(d)) zeigt Hoch- und Tiefdruckgebiet sowie den Temperaturgradienten passend zur Struktur in der Vorticity. Im nicht dargestellten Wind zeigt sich auch für $t = 6$ d starke Hebung im Frontalbereich (ca. 0.3 m/s) und horizontal der entsprechend zwischen Hoch und Tief wehende Wind aus Südost.

7.3.4. Globale Charakterisierung

Dass die finale Zirkulationsstruktur weitgehend barotrop ist — der zentrale Wirbel in Position und Ausdehnung unabhängig von der Höhe — kann einerseits mit der in z sehr beschränkten Modellgeometrie zusammen hängen, andererseits passt dieser Umstand zum Mechanismus der Wirbelentwicklung aus barokliner Instabilität:

Der zyklonale Wirbel ist aus der Energie der baroklinen Instabilität gespeist, welche dadurch abgebaut wird. Die weiteren Zeitreihen in Abb. 7.16 geben einen Einblick. Sie zeigen den zeitlichen Verlauf von drei global gemittelten und durch Quadratur mit

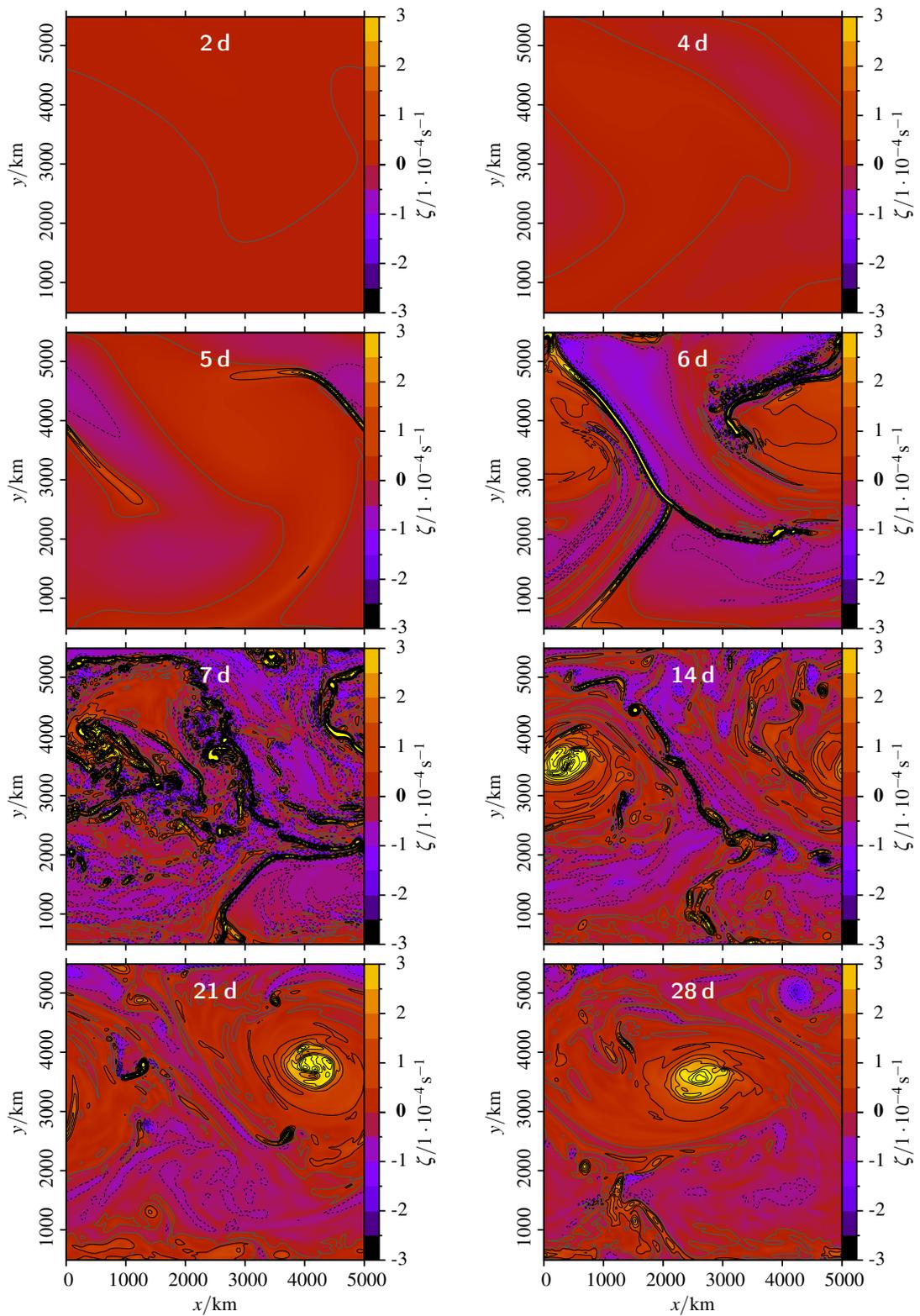


Abbildung 7.13.: Wirbelentwicklung aus Wellenpaket in Ansichten von Horizontalschnitten der Vorticity auf $z = 1$ km Höhe nach 2, 4, 5, 6, 7, 14, 21 und 28 Tagen; Konturintervall $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, Zentralkontur bei 0

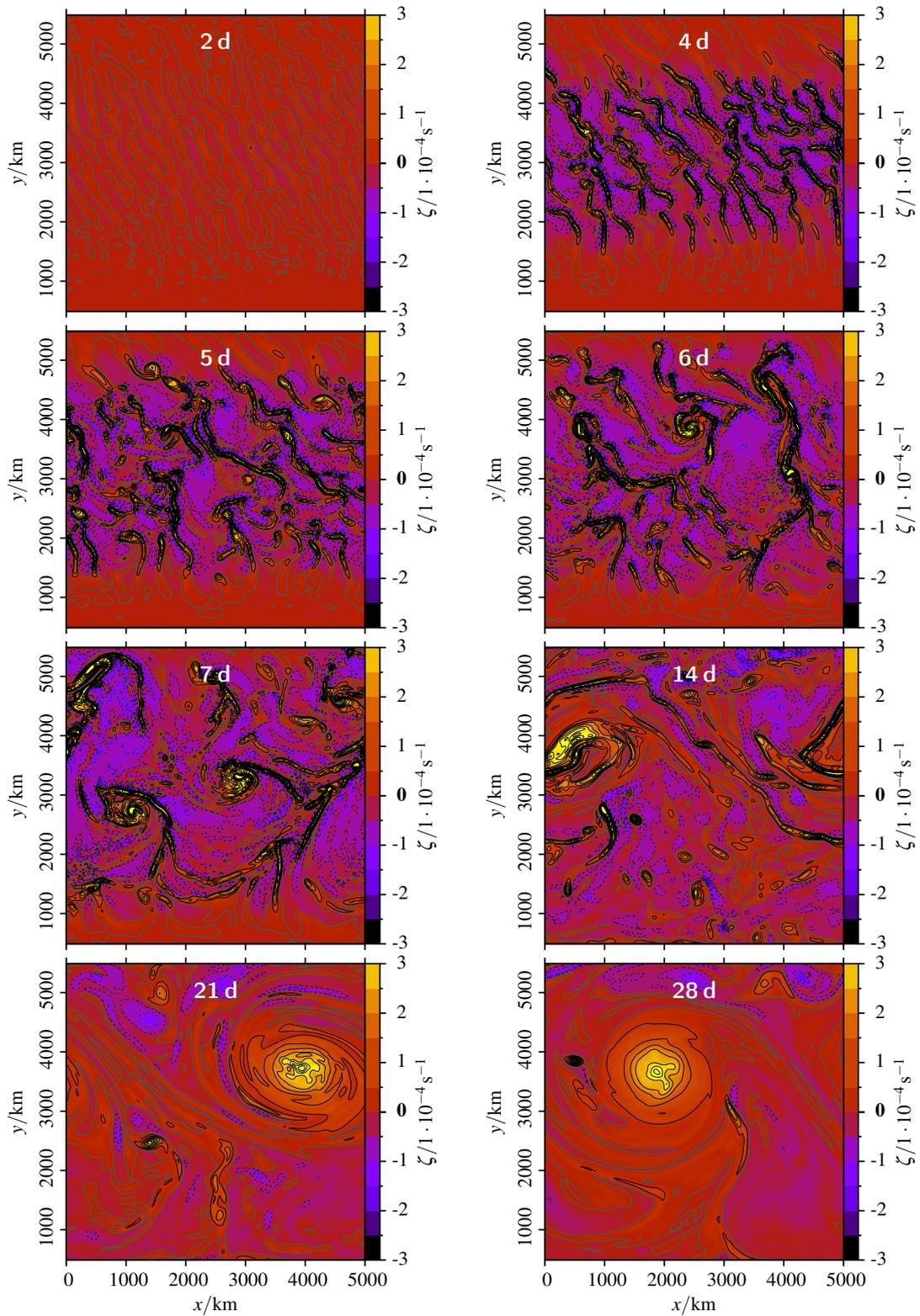


Abbildung 7.14.: Wirbelentwicklung aus Rauschen in Ansichten von Horizontalschnitten der Vorticity auf $z = 1$ km Höhe nach 2, 4, 5, 6, 7, 14, 21 und 28 Tagen; Konturintervall $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, Zentralkontur bei 0

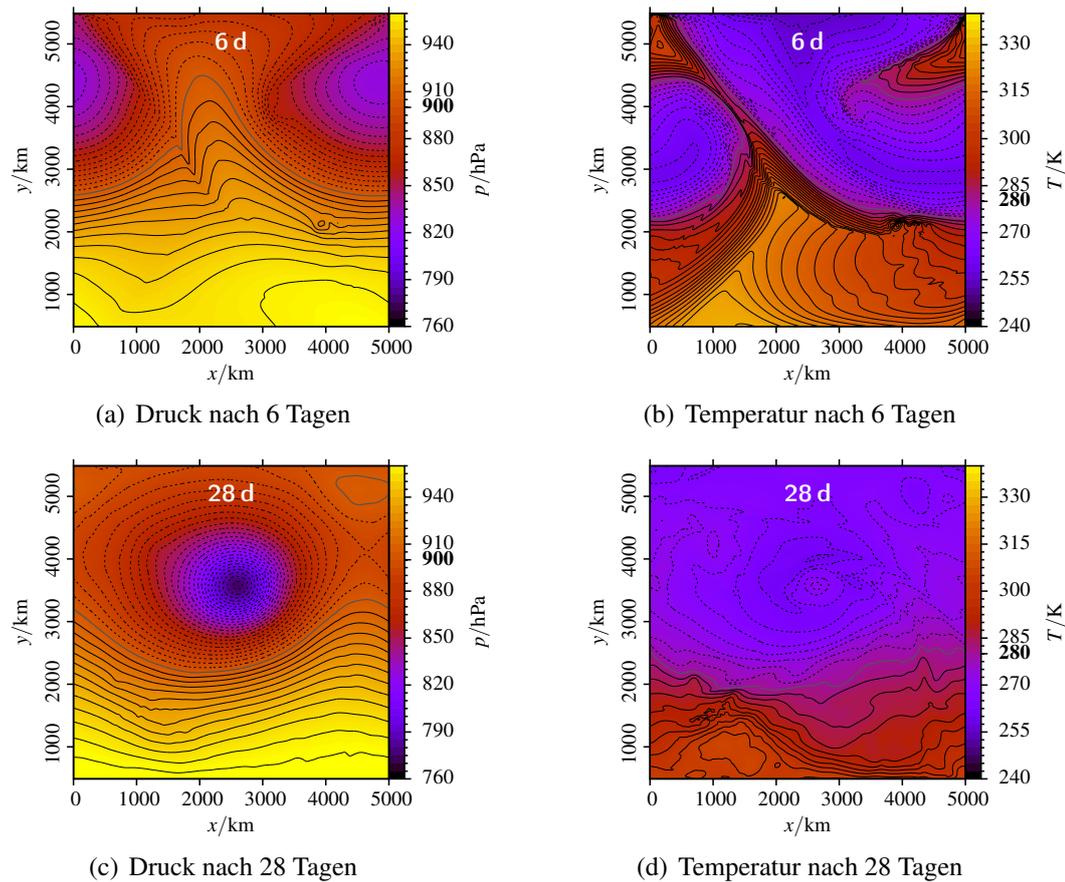


Abbildung 7.15.: Wirbelentwicklung aus Wellenpaket zu ausgewählten Zeitpunkten in Ansichten des Druckes in hPa (Konturintervall 5 hPa, Zentralkontur bei 900 hPa) und der Temperatur in K (Konturintervall 2.5 K und Zentralkontur bei 280 K); Horizontalschnitt bei $z = 1$ km

Volumen gewichteten Größen, die mit der Baroklinität assoziiert sind.

Die erste Größe ist der als in Abs. 4.6 beschriebene Betrag des Kreuzproduktes von Druck- und Temperaturgradient, dessen Verschwinden im geostrophischen Gleichgewicht einen barotropen Zustand anzeigt. Zwar zeigt diese Größe nach anfänglichem Wachstum fallende Tendenz, ist aber noch deutlich über dem Anfangswert. Diese Diagnose der Orientierung der Druck- und Temperaturflächen ist wenig aussagekräftig, solange die Atmosphäre entfernt von einem geostrophischen Gleichgewicht ist. Für Simulationen mit längerer Integrationszeit, welche im Endzustand ein neues geostrophisches Gleichgewicht finden, sollte auch hier die abgebaute Baroklinität erkennbar sein.

Auf der kürzeren Skala gibt aber die ebenfalls in Abb. 7.16 enthaltene vertikale Änderung der potentiellen Temperatur Auskunft darüber, dass Instabilität der Schichtung abgebaut wird: Die Atmosphäre ist statisch deutlich stabiler als zu Beginn. Der Zuwachs der Stabilität fällt zeitlich in den Bereich der Formierung globaler Wirbel, welche für die notwendige Durchmischung sorgen. Auch der anfängliche Vorsprung der langwelligen Anregung mit dem Wellenpaket ist mit den Darstellungen in Abb. 7.13 bzw. Abb. C.2 im Vergleich zu Abb. 7.14 bzw. Abb. C.3 nachzuvollziehen.

Der mittlere Vertikalgradient des horizontalen Windes inklusive meridionaler Komponente ist entsprechend einer barotroperen Struktur im Verlauf der Modellzeit von über 4 m/(s km) erkennbar auf ca. 3 m/(s km) gesunken. Dies entspricht einer Abnahme des thermischen Windes, wobei aber zu betonen ist, dass der Begriff „thermischer Wind“ sich definitionsgemäß nur auf den geostrophischen Wind bezieht, von dem Abweichungen in

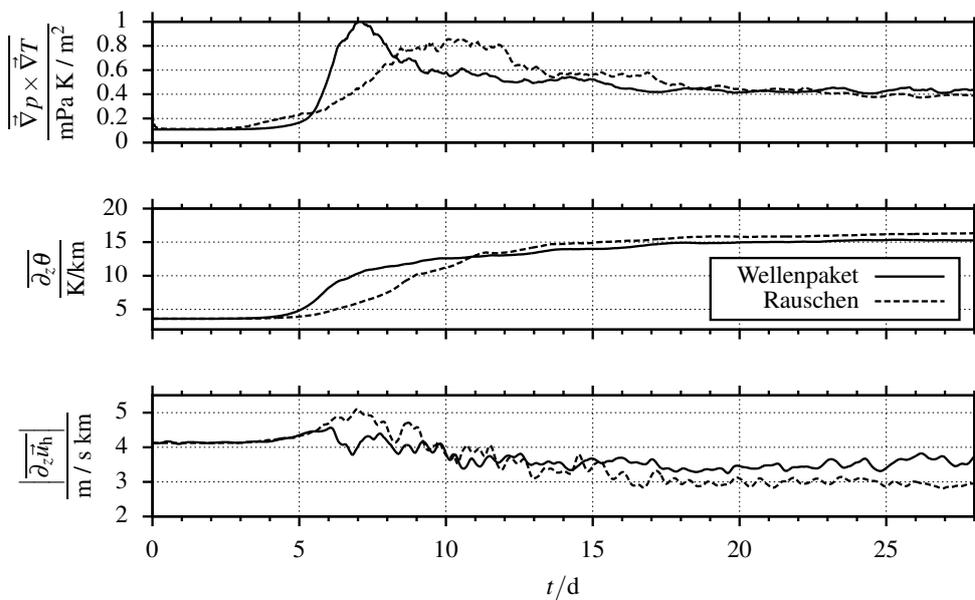


Abbildung 7.16.: Zeitreihen einiger durch Quadratur gemittelter Kenngrößen der Baroklinität bzw. Instabilität des Atmosphärenzustandes im Wirbelentwicklungsexperiment; *oben*: Kreuzprodukt der Druck- und Temperaturgradienten (Neigung der Isoflächen zueinander), *Mitte*: Vertikalgradient der potentiellen Temperatur als Maß für Stabilität der Schichtung und *unten*: Vertikalgradient des horizontalen Windes

diesem Fall deutlich sind. Eine Gemeinsamkeit der drei Darstellungen in Abb. 7.16 ist das Verschwinden der durch die verschiedenen Störungen zwischenzeitlich angeregten Unterschiede zwischen den beiden Läufen: Auf längeren Zeitskalen ist für globale Maße die Form der Störung irrelevant.

7.4. Langzeitentwicklung aus baroklinen Zuständen

Den Abschluss der Charakterisierung der Dynamik der mittleren Breiten unter Einsatz des beschriebenen Modells bildet nach der Untersuchung von Instabilitäten auf Skalen von Tagen oder Wochen eine Analyse der Wellenaktivität in Simulationen des β -Kanals auf voller Länge von 28 000 km über zwei Jahre Modellzeit. Auch die im vorigen Abschnitt angerissene Diagnose des Abbaus von Baroklinität hin zu einem neuen Gleichgewicht kann damit konkretisiert werden.

7.4.1. Konfiguration

In der in Tab. 7.5 umrissenen Modellkonfiguration wird der Grundzustand nach Abs. 4.4 geprägt von der Unterhälfte eines Strahlstroms, mit reflektierendem Oberrand des Modells in 10 km Höhe, beim maximalen Betrag des Windes. Das Windprofil entspricht einer Quadratsinusfunktion in y , eingeeengt auf eine halbe Kanalbreite und zentriert, sowie einer halben solchen in z , so dass der Bereich maximalen thermischen Windes genau in die Mitte der y - z -Ebene fällt. Die Temperatur fällt vertikal von 300 K am Boden in der Kanalmitte polytrop mit $\partial_z T = -6.5$ K/km ab. Der Wind ist komplett bestimmt durch Angabe des Maximums des Profils sowie einem Basiswert, der darauf addiert wird und auch für den Bereich außerhalb des Jets gilt.

Mit einem Basiswind von 15 m/s und Profilhöhe 50 m/s ergibt sich so der Anfangszustand, der in Abb. 4.1 als Beispiel für das numerisch ermittelte geostrophische Feld

| Eigenschaft | Wert (Erläuterung) |
|--------------------------------------|--|
| Dimensionen | 3D (x, y, z) |
| Elemente | $114 \times 24 \times 5$ |
| Basisgrad k | 1 (alle Richtungen) |
| Ausdehnung ($x \times y \times z$) | $28\,000 \text{ km} \times 6000 \text{ km} \times 10 \text{ km}$ |
| Randbedingungen | reflektiv in y und z , periodisch in x |
| Basiszustand | geostrophisch polytrop (Vertikalprofil in Kanalmitte: $\partial_z T = 6.5 \text{ K/km}$ bis 5 km , darüber T konstant) |
| Referenzzustand | identisch (ungestört) |
| Grundstrom u | Basis global zwischen 0 m/s und 70 m/s , darauf halber Quadratsinus in z (maximaler Gradient bei $z = 5 \text{ km}$) ganzer Quadratsinus in y (Windmaximum in der Mitte, nur Basiswind am Rand) |
| Störung | Dichte, gleichverteiltes Rauschen mit Maximalbetrag 1% |
| Zeitschritt | semi-implizit, im Mittel zwischen 58 s und 421 s (siehe auch Abb. 3.6) |
| Simulationsdauer | 720 d |

Tabelle 7.5.: Konfiguration zu baroklinen Langzeitläufen

dient. Der Unterschied zum Wirbelentwicklungsexperiment des vorigen Abschnitts liegt nur in der Form des Windprofils und der erweiterten Geometrie, die auch auf Absorptionsschichten an den reflektierenden Seitenrändern sowie am Oberrand verzichtet. Die folgend verwendeten Konfigurationen sind in Tab. 7.6 aufgeführt. Die Werte hinter „dzu“ im Bezeichner sind als Obergrenze zu verstehen, die der vertikale Gradient des Windes nicht überschreitet. Der tatsächliche maximale thermische Wind ist in der Tabelle zugeordnet. Wichtig ist die relative Anordnung und die Festlegung von Werten deutlich unter und deutlich über der Grenze von 4 m/(s km) als tendenziell unter- und überkritische Baroklinitäten.

| Bezeichnung | Windprofilhöhe | Basiswind | $\max(\partial_z u)$ | Rand |
|--------------|------------------|------------------|------------------------|----------------|
| dzu02b00 | 10 m/s | 0 | 1.6 m / s km | reflektiv |
| dzu02b35 | 10 m/s | 35 m/s | 1.6 m / s km | reflektiv |
| dzu02b70 | 10 m/s | 70 m/s | 1.6 m / s km | reflektiv |
| dzu05b00 | 25 m/s | 0 | 3.9 m / s km | reflektiv |
| dzu08b00 | 40 m/s | 0 | 6.3 m / s km | reflektiv |
| dzu08b00temp | 40 m/s | 0 | 6.3 m / s km | refl. Wärmebad |

Tabelle 7.6.: Unterschiedliche Kenngrößen des Grundstroms in den betrachteten baroklinen Langzeitläufen, insbesondere mit tatsächlichem maximalen thermischen Wind und der lateralen Randbedingung (in y): rein reflektiv oder reflektiv mit festgehaltener potentieller Temperatur, die Kontakt zu Wärmebad simuliert

Dieser Basiszustand dient auch wie zuvor als Referenzzustand für die semi-implizite Zeitintegration. Bei Verwendung eines mittleren Zustandes oder der ruhenden Atmosphäre sind auch keine anderen Advektionsstrukturen zu erwarten — ein eventueller

Unterschied der Rechnung bezieht sich potentiell lediglich auf die implizit gerechneten schnellen Wellen.

Als Störung dieses im Gleichgewicht befindlichen Anfangszustandes kommt gleichverteiltes Rauschen mit einer Amplitude von 1 % zur Dichteverteilung hinzu. Die Integration wird über zwei Jahre Modellzeit angesetzt. Es ist zu erwarten, dass die Energie der baroklinen Instabilität, welche sich auch im horizontalen Temperaturgradienten manifestiert, bei Ausbruch mit der Zeit abgebaut wird und die Dynamik einen stabilen Grundstrom mit reduzierter Baroklinität findet. Eine Anwendung der Wärmebad-Randbedingung aus Abs. 3.3.3 sollte diesen Prozess zumindest verzögern bzw. im Idealfall erneute Baroklinität aufbauen, welche im Laufe der Zeit auch wieder ausbricht.

7.4.2. Entwicklung von Impulsdifferenz und Energie

Die interessanten Bereiche der Entwicklung offenbaren sich wie schon zuvor in der Zeitreihe der relativen Impulsdifferenz, Abb. 7.17. Die Läufe „dzu05b00“ und „dzu08b00“ erreichen nach 20 Tagen einen Zustand des maximalen Unterschiedes in der Impulsverteilung, gar in der relativen Abweichung über eins. Dies ist z.B. möglich, wenn nicht nur Impuls anders verteilt wird, sondern er aus abgebauter potentieller bzw. thermischer Energie erwächst. In dem Verhalten nahe eins liegt auch der erkennbare Unterschied zum Lauf „dzu08b00temp“, welcher die einfache Wärmebad-Randbedingung nutzt. Während „dzu08b00“ wischen eins und zwei fluktuiert, ist ab ca. 100 Tagen die Abweichung für „dzu08b00temp“ recht fest am unteren Bereich dieser Fluktuation, nahe eins. Die Dynamik bis dahin, zumindest bis 20 Tage Modelllaufzeit, ist aber bei diesen beiden Läufen praktisch identisch. Allein vermittelt der Lauf ohne spezielle Randbedingung auch in diesem Bereich etwas mehr hochfrequente Fluktuation.

Die Läufe „dzu02b00“, „dzu02b35“ und „dzu02b70“ liegen in der logarithmischen Darstellung der Differenznorm deutlich unter den anderen und, wenn auch Bewegung zu ersehen ist, so ist in diesen relativ kleinen Bereichen nur eine moderate Veränderung des Grundstromes zu vermuten, kein Aufbrechen der Strömung mit Wirbelentwicklung. Besonders trifft das auf die Läufe mit Basiswind zu, deren relative Differenznorm über eine Größenordnung unter der von „dzu02b00“ liegt. Der konstante Basiswind wurde definiert, um zu prüfen, ob der damit erhöhte mittlere Wind oder der den Läufen mit mehr Baroklinität ähnliche horizontale Temperaturgradient zur Instabilität beiträgt. Beide Punkte können verneint werden. Vielmehr wirkt die Hinzunahme des Basiswindes stabilisierend. Allerdings kann die relative Abweichung hier etwas trügen, da die Referenzgröße, auf die er sich bezieht, erheblich größer ist. Das Bild ist aber eindeutig genug, um fortan die Läufe mit Basiswind in der Analyse nicht weiter gesondert zu betrachten.

Die Zeitreihen der Energiedifferenzen in Abb. 7.18 bieten einen weiteren Blickwinkel auf die zeitliche Entwicklung, speziell die kinetische Energie, die eng mit der Impulsabweichung verknüpft ist. Die Energieerhaltung zeigt Abweichungen im Bereich von $1 \cdot 10^{20}$ J, was noch immer klein gegenüber dem Gesamtintegral der Energie von ca. $3 \cdot 10^{23}$ J, ist, aber nicht völlig gegenstandslos. In der Dynamik überrascht es wenig, dass bei den drei Läufen ohne Energieaustausch mit der Umgebung in den ersten 100 Tagen einseitig potentielle und innere Energie zugunsten der kinetischen Energie abgebaut wird, was zu einer Erhöhung der Impulsabweichung in dieser Zeit passt. Allerdings ist dieser Effekt bei „dzu02b00“ ohne logarithmische Skale nur sehr schwach zu erahnen. Dagegen ist bei dem Lauf mit Wärmebad die Auswirkung auf die thermische Energie und über diese auch auf die Gesamtenergie deutlich. In der Entfaltungsphase der Instabilität gibt es schnellen Wechsel zwischen Abnahme, leichter Zunahme und wieder Abnahme der Energie. Das spricht für eine Durchmischung, die wechselseitig einen Schwerpunkt in der

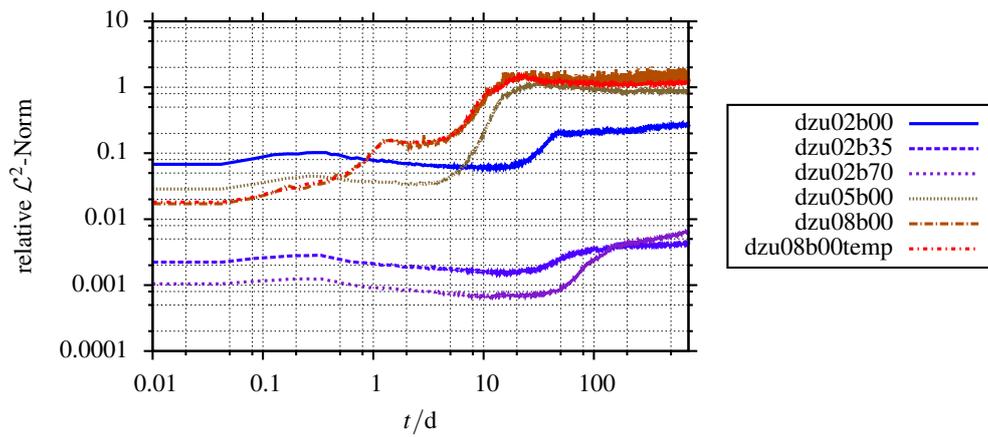


Abbildung 7.17.: Zeitreihen der relativen Differenznorm der Impulsverteilung (zum Referenzzustand) für die verschiedenen Läufe mit Kennzeichnung gemäß Tab. 7.6

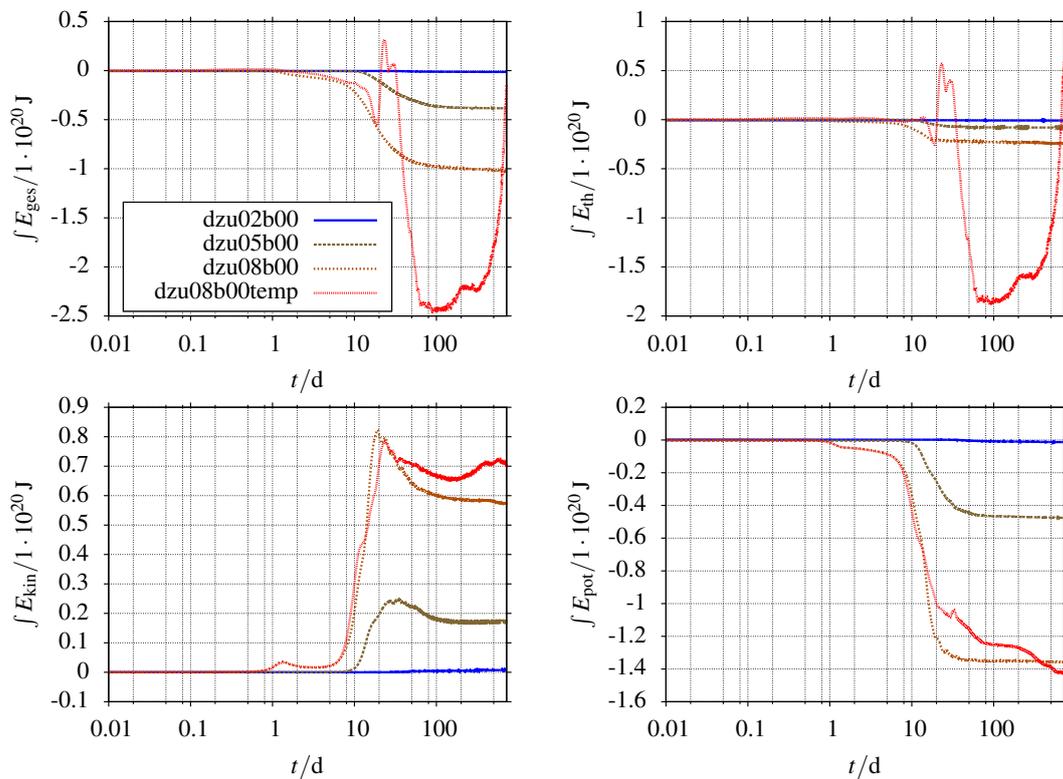


Abbildung 7.18.: Zeitreihen der Integrale der Energiedichten der Langzeitläufe, jeweils im Vergleich die Gesamtenergie E_{ges} , die innere Energie E_{th} , die kinetische Energie E_{kin} und die potentielle Energie E_{pot}

Advektion kalter Luft zum wärmeren Wärmebad im Süden und der Advektion warmer Luft an die Gegenseite aufweist. Zudem ist ein langfristiger Effekt der Wärmebäder auf die kinetische Energie zu beobachten, welche mit diesen etwas höher liegt. Insgesamt sind die integralen Energieflüsse aber auch mit Wärmebädern kaum außerhalb des Bereiches des kleinen Fehlers, der ohnehin in der Energieerhaltung auftritt. Es sind in der Dynamik somit auch eher subtile Effekte zu erwarten.

Die Zeitreihen identifizieren Zeitpunkte, die für den jeweiligen Lauf markante Strukturen aufzeigen sollten. Die „dzu08b00“-Läufe zeigen bei einem Tag die Flanke der ersten Differenz-Wachstumsphase, die sich auch in der kinetischen Energie andeutet. Nach zehn Tagen sind die „dzu08b00“-Läufe in ihrer zweiten, finalen Wachstumsphase, die auch mit deutlichem Anwachsen der kinetischen Energie verbunden ist. Für „dzu05b00“ beginnt hier das Wachstum in der kinetischen Energie insbesondere zu Lasten potentieller Energie, wie es für „dzu08b00“ im vollen Gange ist. Nach 20 Tagen sind die drei nennenswert instabilen Läufe in Impulsabweichung und kinetischer Energie weitgehend auf dem Maximum. Die Entwicklung der Dynamik auf diesem Niveau sollten Ansichten nach 100 Tagen und zum Schluss der Läufe, nach 720 Tagen, charakterisieren.

7.4.3. Vorticity im Horizontalschnitt

Die resultierenden Bildfolgen der Vorticity auf der Höhe des in Abb. 4.1 ersichtlichen Maximums des vertikalen Windgradienten bei 5 km Höhe sind für „dzu02b00“ in Abb. 7.19, für „dzu05b00“ in Abb. 7.20, für „dzu08b00“ in Abb. 7.21 und schlussendlich für „dzu08b00temp“, also dem Lauf mit lateralen Wärmebädern, in Abb. 7.22 zu finden.

Diese Ansichten bestätigen die aus den Zeitreihen abgeleiteten Aussagen bezüglich Stärke und Zeitpunkt von Instabilitätsausbrüchen. Der Lauf mit geringem thermischen Wind („dzu02b00“, Abb. 7.19) zeigt sehr geringe Aktivität. Wirbel sind keine zu erkennen, aber doch findet augenscheinlich ein Übertrag von Energie aus der noch immer vorhandenen Baroklinität in den Grundstrom statt, der minimal stärker ausgeprägt wird. Mit mittlerem thermischen Wind („dzu05b00“, Abb. 7.20) ist ein Herauslösen von Wirbeln mit Wellenzahl 10 zu beobachten, welche nach 20 Tagen ihre Wellenzahl auf 9 verringern und mittelfristig in eine Welle 5 übergehen sowie gegen Ende der Simulationszeit sich im verbreiterten Grundstrom auflösen.

Ähnlich ist das Bild mit starkem thermischen Wind („dzu08b00“, Abb. 7.21). Die Wirbel sind stärker, fangen mit Wellenzahl 10 an und gehen schneller in größeren Wellen auf (erst Wellenzahl 6 anstatt 9, dann 4 anstatt 5). Nach Ablauf der Simulationszeit von 720 Tagen ist im verbreiterten Grundstrom noch eine Welle 1 zu erahnen. Mit lateralen Wärmebädern sieht die Anfangsphase strukturell gleich aus, jedoch kann sich die Welle 4 bis zum Simulationsende erkennbar halten. Die Randbedingungen haben somit doch einen in der Dynamik nachweisbaren Effekt.

Ergänzend zu diesen Abbildungen bei 5 km sind im Anhang entsprechende Darstellungen der Vorticity des Laufs „dzu08b00“ in 2 km (Abb. C.4) und 8 km (Abb. C.5) beigefügt. Diese zeigen barokline Verschiebungen in der Anfangsphase, sind aber entsprechend der im Weiteren diskutierten Entwicklung zum barotropen Zustand zu späteren Zeitpunkten dynamisch äquivalent zu den Darstellungen bei 5 km.

Die Skale der sich entwickelnden Wellenlängen passt auch hier zur linearen Analyse in Abb. 7.9, insbesondere im Vergleich zum Wirbelexperiment mit zwei Elementen und 5 km Höhe zeigen die Langzeitläufe mit fünf Elementen auf 10 km Höhe klare Tendenz zu größeren Wellenlängen über 1000 km — die beginnende Welle 10 ca. 3000 km entsprechend. Mit 10 km Höhe ist der Bereich der instabilsten Wellen in Abb. 7.9 recht breit und aus dem Stabilitätsdiagramm erklärt sich auch die im Vergleich von „dzu05b00“

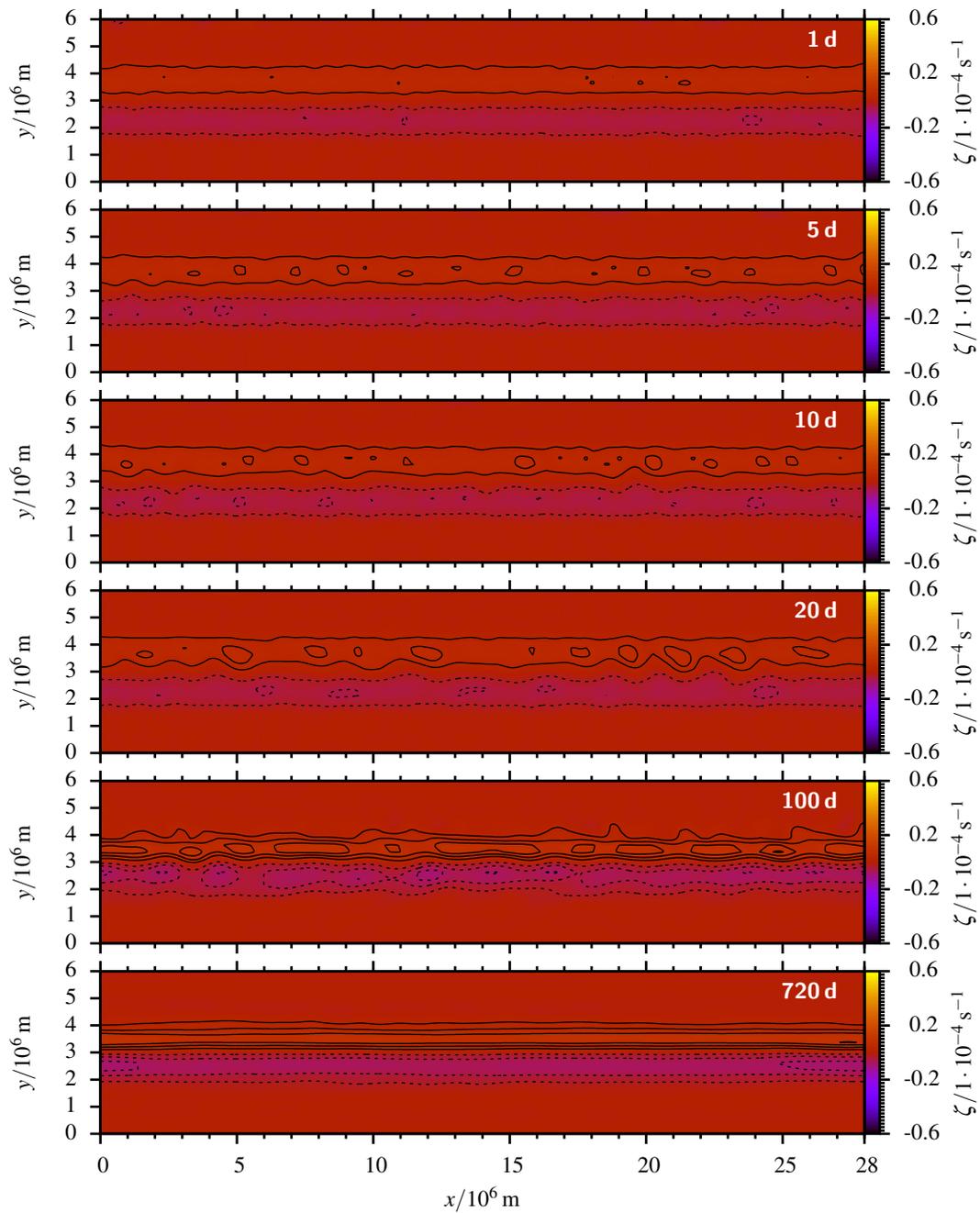


Abbildung 7.19.: Ansichten des Laufs mit geringem thermischen Wind („dzu02b00“, $\partial_z u \leq 1.6 \text{ m/s km}$), Vorticity nach 1 d, 5 d, 10 d, 20 d, 100 d sowie 720 d, Horizontalschnitt bei 5 km, , Konturintervall $2.5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

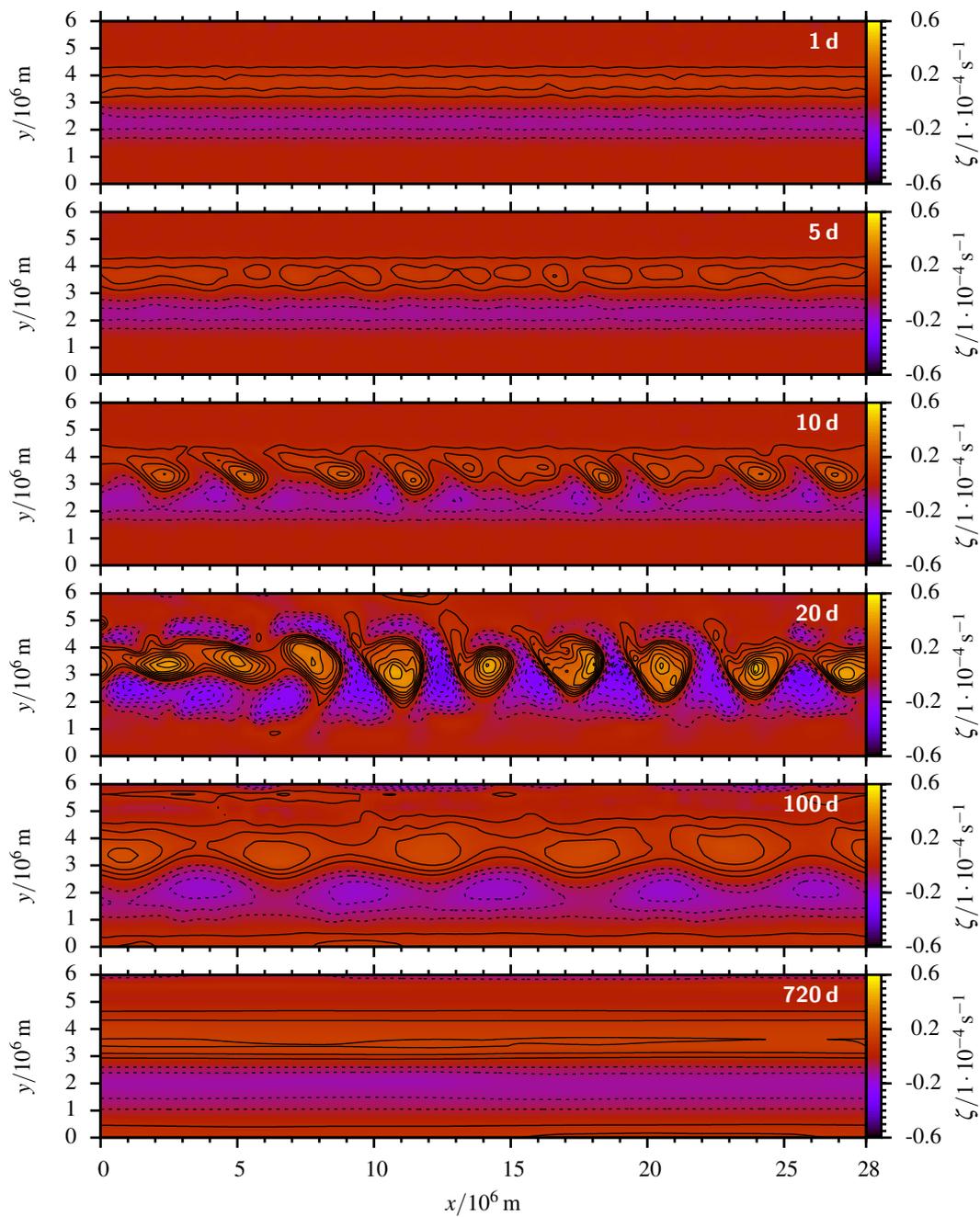


Abbildung 7.20.: Ansichten des Laufs mit mittlerem thermischen Wind („dzu05b00“, $\partial_z u \leq 3.9 \text{ m/s km}$), Vorticity nach 1 d, 5 d, 10 d, 20 d, 100 d sowie 720 d, Horizontalschnitt bei 5 km, Konturintervall $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

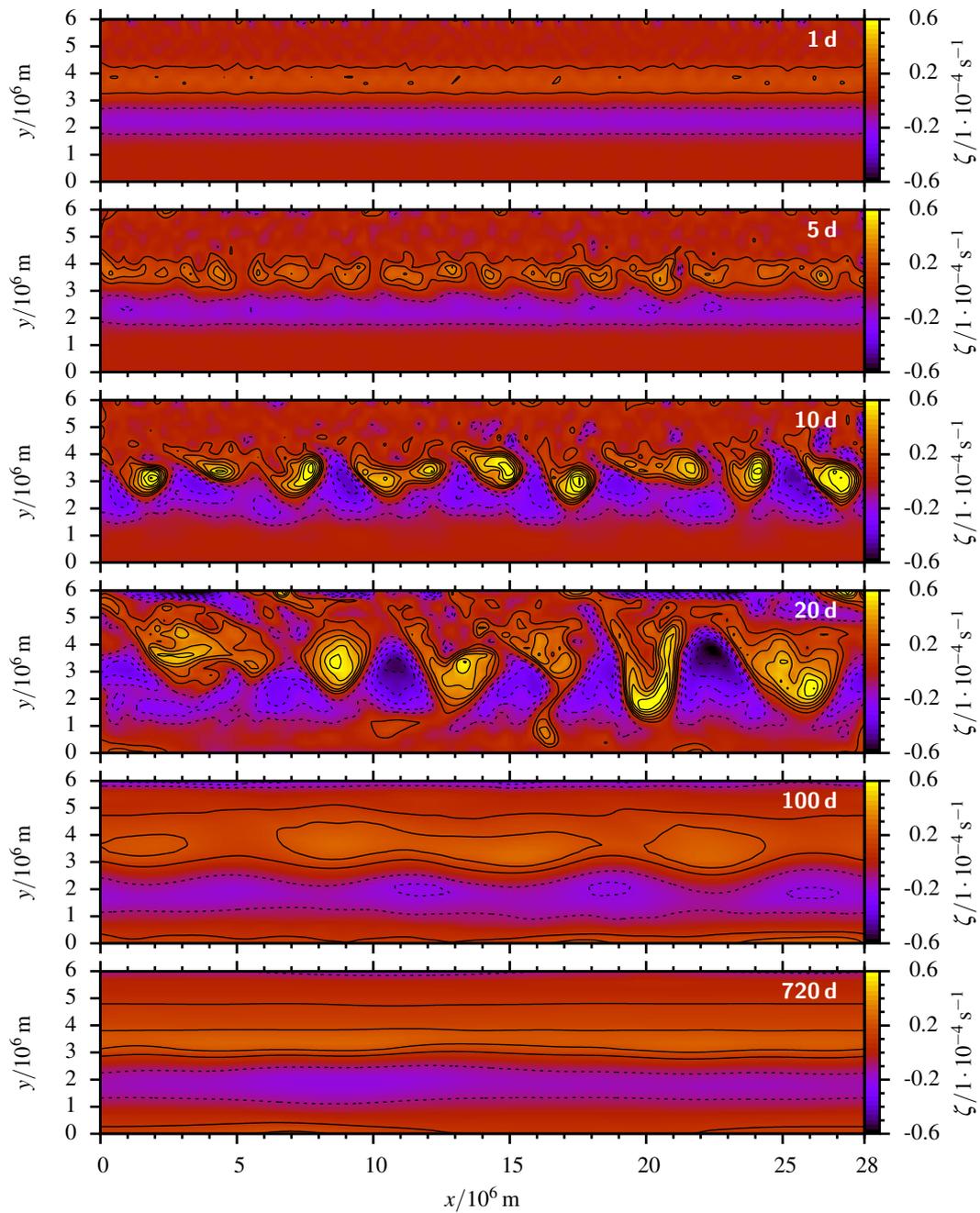


Abbildung 7.21.: Ansichten des Laufs mit großem thermischen Wind („dzu08b00“, $\partial_z u \leq 6.3 \text{ m/s km}$), Vorticity nach 1 d, 5 d, 10 d, 20 d, 100 d sowie 720 d, Horizontalschnitt bei 5 km, Konturintervall $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

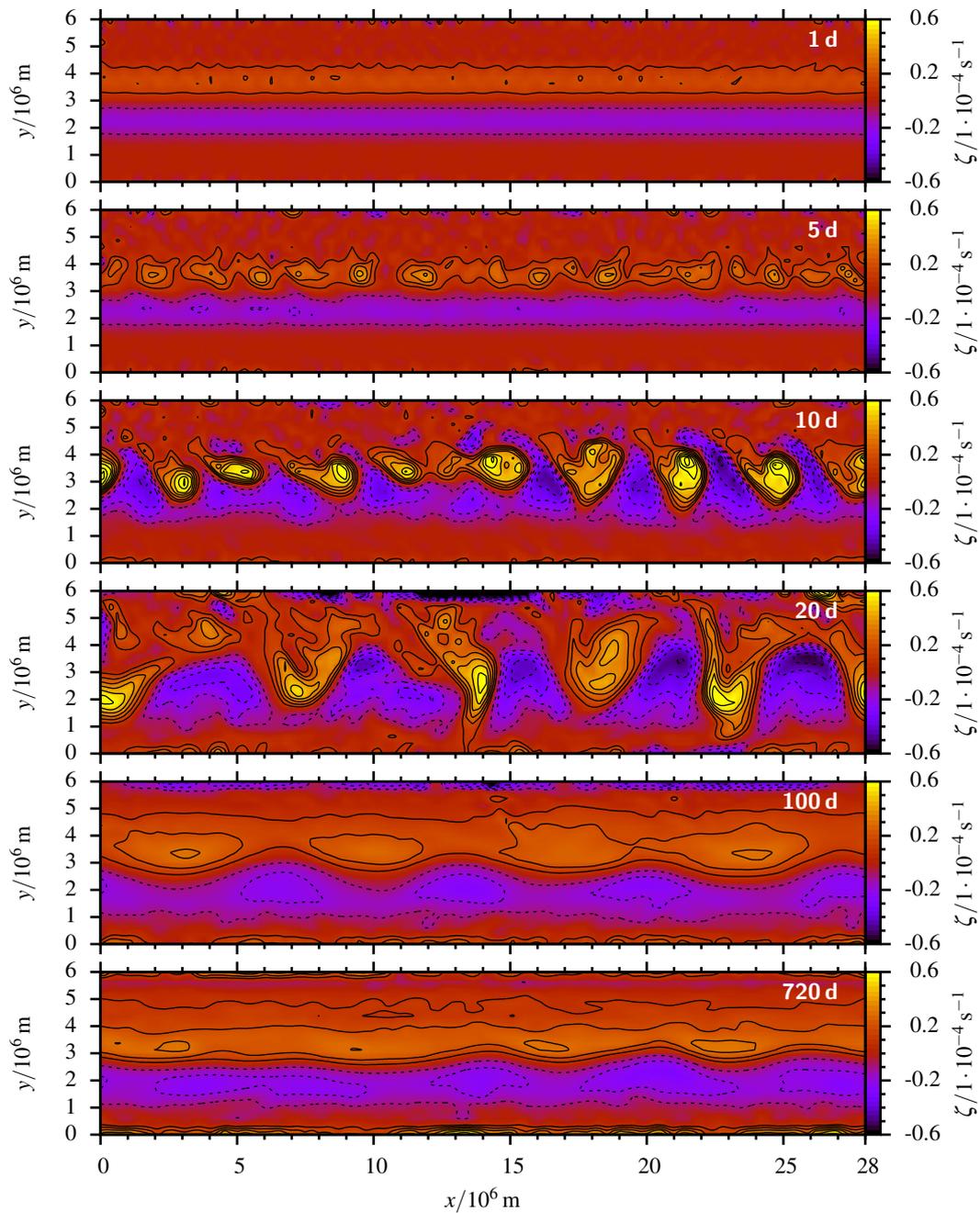


Abbildung 7.22.: Ansichten des Laufs mit großem thermischen Wind und lateralen Wärmebädern („ $\partial_z u \leq 6.3 \text{ m/s km}$ “), Vorticity nach 1 d, 5 d, 10 d, 20 d, 100 d sowie 720 d, Horizontalschnitt bei 5 km, Konturintervall $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

(Abb. 7.20) zu „dzu08b00“ (Abb. 7.21) erkennbare Tendenz zu größeren Wellen bei erhöhter Baroklinität. Die vollständigen Stabilitätskarten, zusätzlich zu der einzelnen Kontur in Abb. 7.9, sind in im Anhang in Abb. C.1 zu finden.

7.4.4. Globale Charakterisierung

Die Differenzen in der Dynamik zeigen sich auch deutlich Abb. 7.23, der Zusammenstellung von gemittelten Kenngrößen des Zustandes, wie sie in Abs. 7.3.4 beschrieben sind. Der grundlegenden Unterschied zwischen „dzu02b00“ und den Läufen mit stärkerer Baroklinität ist auch hier deutlich: Nur letztere zeigen nennenswerte Dynamik in allen drei gemittelten Kenngrößen. Bei den anderen sind, wie auch schon in der Entwicklung der Impulsdifferenz (Abb. 7.17) und der Energien (Abb. 7.18), eine Einteilung der Entwicklung in drei Phasen naheliegend: Vorlauf von ca. einem Tag Länge, dann dynamische Phase bis ca. zwei Wochen nach Beginn, danach Streben in ein Gleichgewicht.

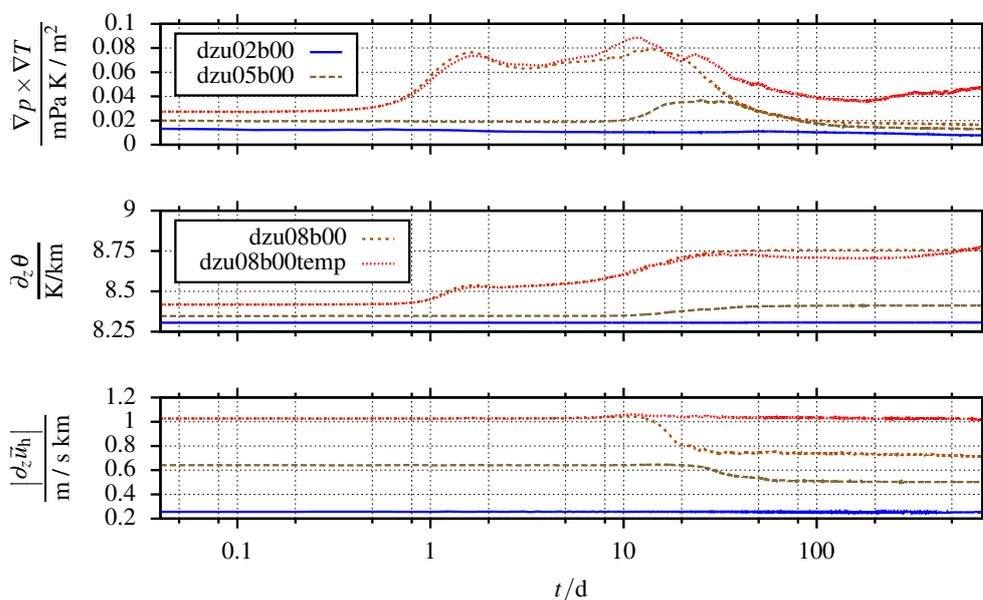


Abbildung 7.23.: Zeitreihen einiger durch Quadratur gemittelter Kenngrößen der Baroklinität bzw. Instabilität des Atmosphärenzustandes in den Langzeitsimulationen mit unterschiedlicher barokliner Instabilität (entsprechend in Legende gekennzeichnete Läufe); *oben*: Kreuzprodukt der Druck- und Temperaturgradienten (Neigung der Isoflächen zueinander), *Mitte*: Vertikalgradient der potentiellen Temperatur als Maß für Stabilität der Schichtung und *unten*: Vertikalgradient des horizontalen Windes

Die dynamische Phase ist durch Zunahme der statischen Stabilität, aber auch Zunahme der diagnostizierten Baroklinität (Kreuzprodukt von Druck- und Temperaturgradient), geprägt. Beides ist bei „dzu05b00“ mit der relativ geringen baroklinen Instabilität aber erst zum Ende dieser Phase sichtbar, während die beiden Läufe mit hoher Baroklinität eine Teilung in zwei Unterphasen erkennen lassen. Bei diesen wird auch eine Korrelation zwischen lokalem Maximum der Baroklinität und Anwachsen der Schichtungsstabilität offenbar: Zeiten der Umwälzung der Atmosphäre, welche die Schichtung ändern und Temperaturdifferenzen verringern, zeigen sich in der unterschiedlichen Orientierung von Druck- und Temperaturgradienten, welche bei zeitlich lokal maximaler Änderung der Stabilität jeweils ein lokales Maximum aufweist. Bei „dzu05b00“ ist dies nur am Ende der dynamischen Phase erkennbar.

Zum Beginn der abschließenden Phase verringert sich bei allen Läufen mit nennenswerter barokliner Instabilität dann auch die mittlere vertikale Scherung des horizontalen

Windes und erreicht nach ca. 100 Tagen einen relativ stabilen Wert. Prominente Ausnahme ist hier der Lauf mit lateralen Wärmebädern: Ist der Einfluss dieser auf die Änderungen der Schichtung in der dynamischen Phase noch marginal, so ist der Unterschied auf langer Zeitskala eklatant. Die Windscherung bleibt praktisch über die gesamte Simulationszeit konstant und die Baroklinität stabilisiert sich auf höherem Niveau bzw. steigt im zweiten Jahr — ein Aufbau dieser bis hin zu einer erneuten kritischen Instabilität ist denkbar, aber bleibt ohne längere Simulation Spekulation. Zukünftige Simulationen, mitunter mit realistischerer Heizung über den Boden bzw. vorgegebenem Energieaustausch, der Warmluftadvektion aus den Tropen simuliert, hätten Potential, wiederkehrende Dynamik der baroklinen Instabilität zu demonstrieren.

Bei den Läufen ohne Wärmebäder sinkt die Baroklinität unter den Anfangswert von „dzu05b00“. Es ist ein stabiler Zustand mit reduzierter Baroklinität erreicht, von dem ohne externen Antrieb keine neuen Ausbrüche von Instabilität zu erwarten sind, wie es für „dzu02b00“ von Anfang an gegeben war.

7.4.5. Wavelet-Spektrum

Einen Überblick über die Entwicklung von Wellen in der Zeit liefert die Wavelet-Analyse, die in Abs. 7.1 bereits genutzt wurde, um aus einer Zeitreihe von Druck bzw. Temperatur die Zeitskalen von Änderungen dieser abzubilden. Als Messpunkt für die Zeitreihen wird die dreidimensionale Mitte des Kanals⁵ gewählt, qualitativ hängen die Wavelet-Spektren, dank der den Kanal ausfüllenden Dynamik nicht wesentlich von der Position des Punktes ab. Punkte am lateralen Rand sind etwas ungünstiger, mit zunehmender Höhe skaliert die Wellenenergie herunter (da Absolutwerte von Druck und Temperatur abnehmen). Es resultieren für die vier relevanten Läufe die Wavelet-Spektren in Abb. 7.24, ermittelt an einem Punkt nahe dem Zentrum (horizontal und vertikal) des Modellgebietes.

Auch mit der logarithmischen Farbskala über vier Größenordnungen zum gegenseitigen Vergleich ist bei „dzu02b00“ (Abb. 7.24(a)) keine nennenswerte Wellenaktivität im Spektrum zu diagnostizieren, was zu den bisherigen Erkenntnissen passt. Bei „dzu05b00“ (Abb. 7.24(b)) ist die grundsätzliche Dynamik der baroklinen Instabilität bereits sichtbar, mit auch langfristiger Aktivität im Bereich von einer Woche Periodendauer und anfänglich stärkerer, aber schneller abklingender Aktivität auf Zweiwochenskala. Die Verstärkung der baroklinen Instabilität beim Wechsel zu „dzu08b00“ (Abb. 7.24(c)) sorgt dafür, dass die Wochenskala deutlich dominanter wird und sich die Wellen insgesamt zu etwas kürzeren Perioden verschieben, entsprechend dem Effekt der schnelleren Advektion von Strukturen im stärkeren Grundstrom. Die Verstärkung der langfristigen Wellenaktivität auf Wochenskala ist aber unabhängig davon präsent.

Es ist ein Kontrast zum Spektrum eines Laufs mit barotroper Instabilität in Abb. 7.4 gegeben, in dem neben diffuser Aktivität auf der Skala von wenigen Tagen die dominanten Perioden auf der Skala von zwei Wochen oder darüber liegen. Die Separation der dominanten Bereiche in den Spektren ist ein Anzeichen für die im Wesen verschiedene Dynamik der barotropen und der baroklinen Konfiguration. Dabei bedeutet dies nicht, dass die dominanten Wellen im baroklinen Modell selbst ausgeprägt baroklin sind — ein anfangs baroklin instabiler Zustand ohne Randantrieb entwickelt sich langfristig eher barotrop, da die Baroklinität durch die Instabilität abgebaut wird. Die Baroklinität des Anfangszustandes äußert sich eben darin, dass nennenswerte Wellenaktivität entsteht, auch ohne hohe horizontale Windscherung mit Maxima in der Vorticity, der Vorbedingung

⁵ Genau ist es der Mittelpunkt des Elementes (62, 12, 3) in (x, y, z) , etwas abseits der Mitte in x , was aber keine Rolle für das Ergebnis spielt.

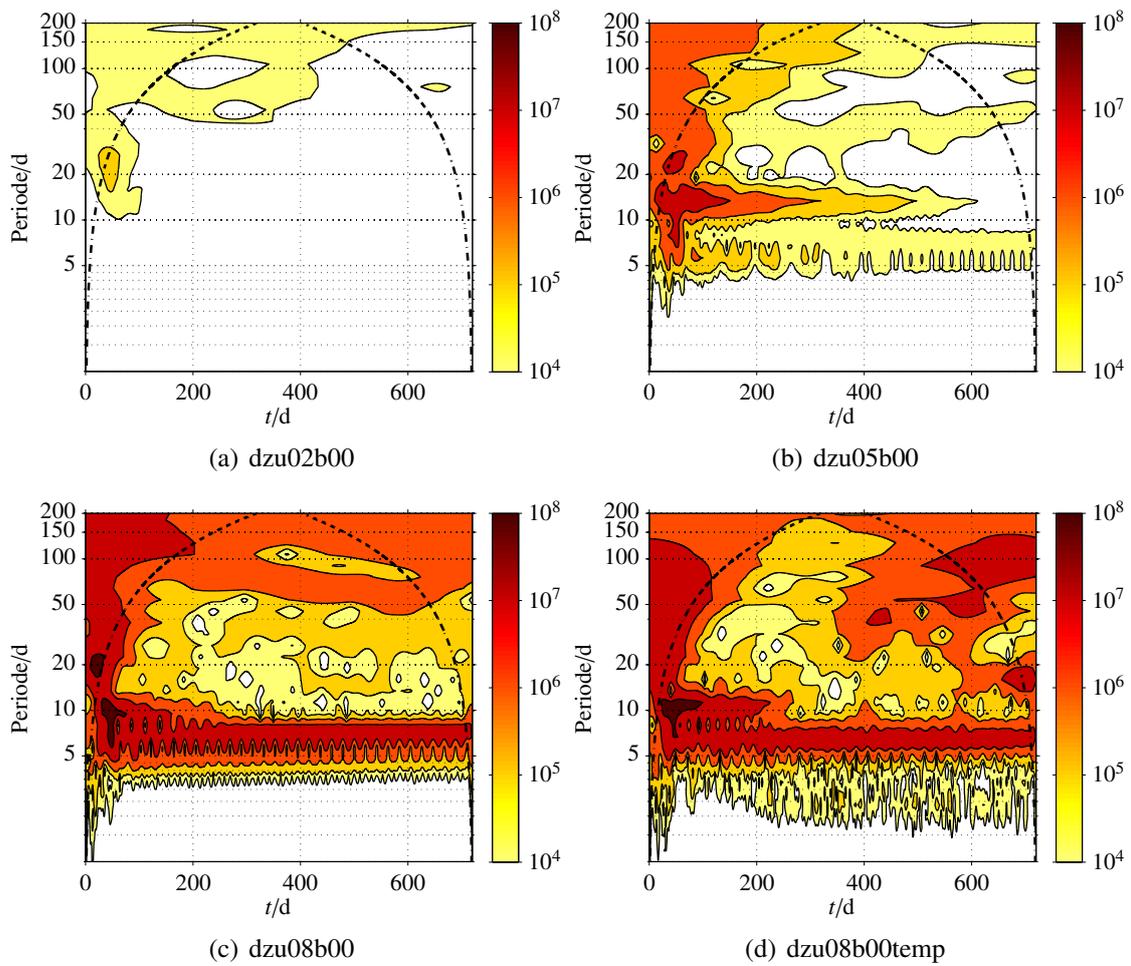


Abbildung 7.24.: Wavelet-Spektren (Werte in Pa^2) des Langzeitverhaltens der baroklinen Instabilität aus Zeitreihen des Druckes nahe dem dreidimensionalen Zentrum des Kanals für die Läufe „dzu02b00“, „dzu05b00“, „dzu08b00“ sowie „dzu08b00temp“

für barotrope Instabilität.

Die Hinzunahme von Wärmebädern in „dzu08b00“ äußert sich in Abb. 7.24(d) vor allem durch die Andeutung einer Zunahme auf längeren Skalen gegen Ende der Simulationsdauer. Wie es bereits die Zeitreihe der Baroklinität in Abb. 7.23 andeutet, kann dies als Zeichen einer beginnenden Restauration der baroklinen Instabilität durch den Randantrieb gewertet werden.

7.4.6. Zonales Mittel

Die Verknüpfung der baroklinen Instabilität mit dem Transport von Wärme, dem Abbau der Temperaturgradienten, die den baroklinen Zustand kennzeichnen, kann in einer einfachen Darstellung der vertikal gemittelten Differenz des Temperaturzonalmittels am Ende zum Anfangszustand zusammenfassend diagnostiziert werden. Die mittlere Differenz der Temperatur zum Anfangszustand als Funktion der Breite y in Abb. 7.25 offenbart, dass vermehrte Baroklinität stärker den allgemeinen Temperaturgradienten verringert, indem im Süden die Temperatur gesenkt wird und im Norden erhöht. Die lateralen Wärmebäder wirken dem bei „dzu08b00temp“ entgegen und schwächen den Effekt des Wärmetransportes durch barokline Instabilität ab.

Im Detail wird der langfristige Effekt der starken baroklinen Instabilität von „dzu08b00“

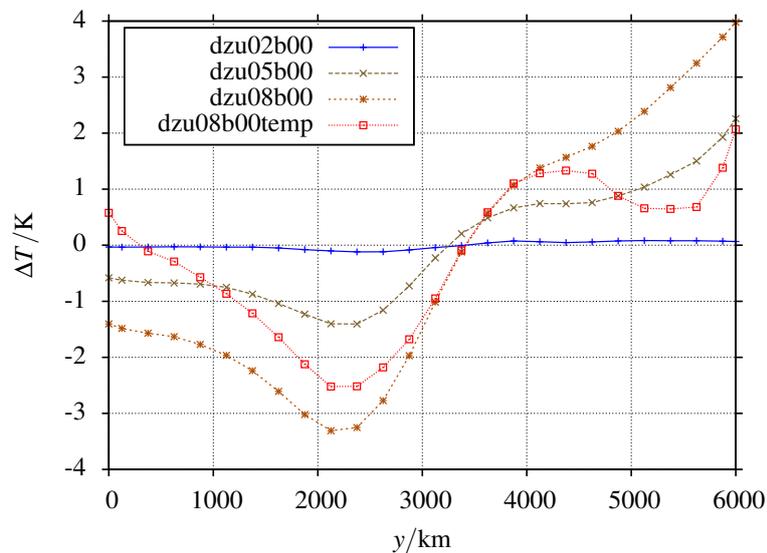


Abbildung 7.25.: Abbau des Temperaturgradienten durch barokline Instabilität, in Darstellung durch die vertikal gemittelte Differenz ΔT des Zonalmittels der Temperatur am Ende zum Anfangszustand

von zonalen Mitteln des Zonalwindes, des Druckes und der Temperatur bezeugt. In Abb. 7.26 sind diese für Anfangszustand und Endzustand nach zwei Jahren gegenübergestellt. Der zonale Grundstrom ist am Ende etwas verbreitert und in Richtung Süden ($y = 0$) verschoben. Markant ist die Reduktion des vertikalen Gradienten und ein residualer Gegenstrom am Nordrand, der aus der Drehung der angeregten Wirbel auch nach deren Auflösung bleibt. Der reflektierenden Nordrand verhindert Abtransport des Impulses in Gegenrichtung. In diesem Aspekt verhielte sich das Modell mit Kugelgeometrie ohne den künstlichen Rand anders.

Der Druck ist im horizontalen Gradienten im Mittel etwas reduziert. Deutlichstes Merkmal des Endzustandes ist ein in allen Höhen präsent Minimum bei $y = 4000$ km, im Unterschied zur monotonen Zunahme des Druckes nach Süden im Anfangszustand.

Die Veränderung im Zonalmittel der Temperatur ist eine Verringerung der Extreme der höchsten und der niedrigsten Temperatur, sowie damit verbunden eine Reduktion der Gradienten. Das Minimum auf der Nordhälfte bei 6 km Höhe ist um ca. 7.5 K reduziert, das Maximum im Süden am Boden um ca. 2.5 K. Eine Reduktion der generellen vertikalen Temperaturabnahme, entsprechend der erhöhten Stabilität der Schichtung, ist ebenfalls in Abb. 7.26 zu erkennen.

Insgesamt werden Eigenschaften der baroklinen Instabilität vom vorgestellten Lösungsverfahren in den behandelten Konfigurationen gut erfasst und belegen, dass die entwickelte Methodik auch in diesem Aspekt zur Simulation der atmosphärischen Dynamik erfolgreich eingesetzt werden kann.

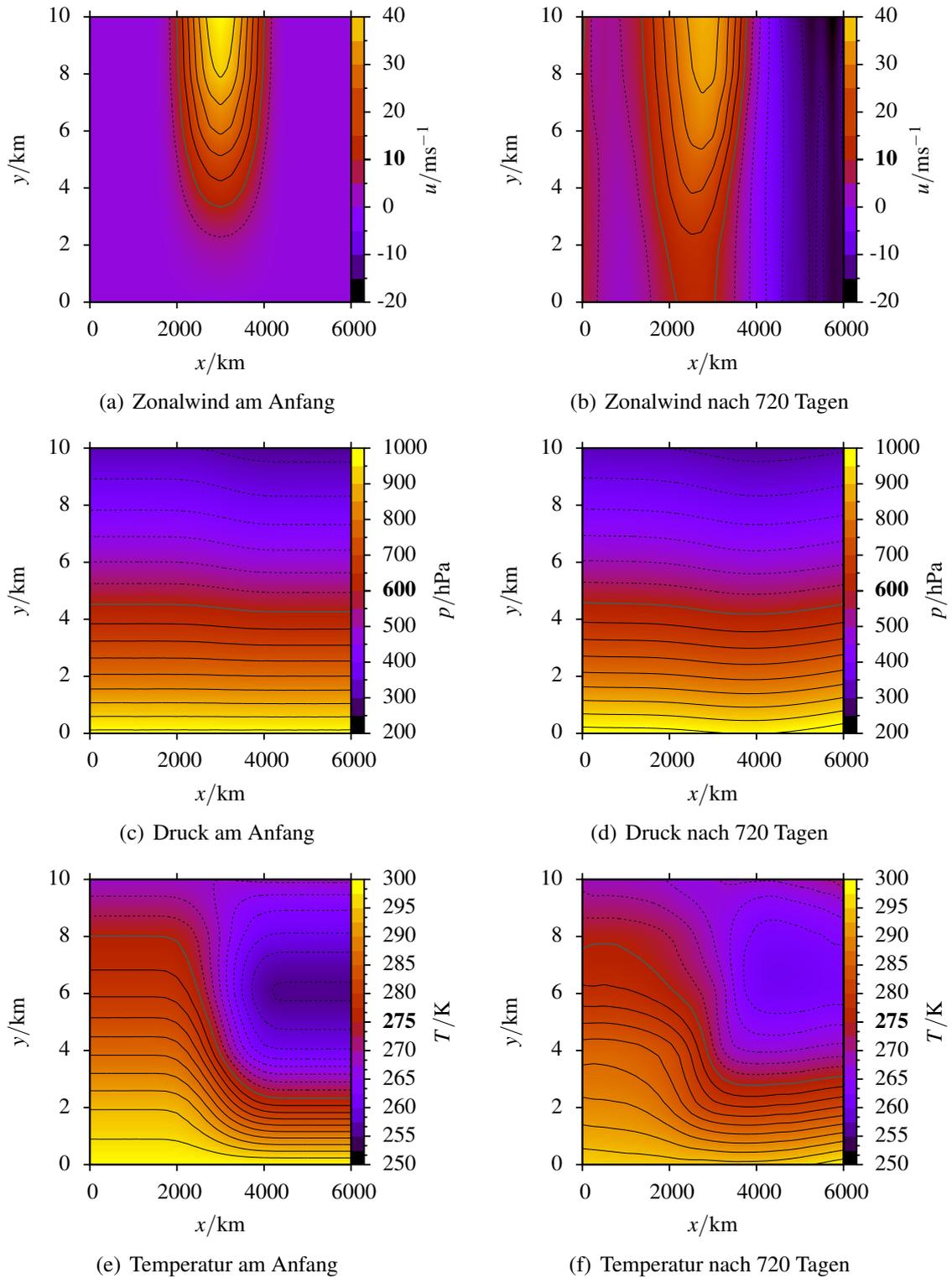


Abbildung 7.26.: Zonalmittel am Anfang und zum Ende der Simulation mit hoher barokliner Instabilität („dzu08b00“), Zonalwind in m/s mit Konturintervall 5 m/s, Druck in hPa mit Konturintervall 50 hPa, Temperatur in K mit Konturintervall 2.5 K

8. Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit belegt die Entwicklung eines atmosphärischen Multiskalenmodells in der Geometrie des β -Kanals unter Einsatz der un stetigen Galerkin-Diskretisierung (DG) mit niedriger Ordnung. Auch mit dem Ansatz eines regelmäßigen Rechteckgitters sind Aspekte der Adaptivität durch eine analytische Gittertransformation eingebunden. Explizite und semi-implizite Zeitschrittverfahren stehen zur Auswahl. Weiterhin sind die Zahl der Raumdimensionen und deren Ausdehnung als auch Ausrichtung im dreidimensionalen Raum Parameter des entwickelten Verfahrens, so dass eine flexible Plattform geschaffen wurde, um atmosphärische Dynamik auf verschiedenen Skalen mit der DG-Diskretisierung zu untersuchen.

Die Eignung des entwickelten DG-Verfahrens mit niedrigem Polynomgrad für die Anwendung in einem nichthydrostatischen Modell der trockenen Atmosphäre konnte demonstriert werden. Eine Bedingung dafür sind Anpassungen der Methodik von Cockburn (1998) zur Behandlung der Wirkung von Erdanziehungskraft und Corioliskraft im Bezug zur Druckgradientenkraft.

Die Auswertung der Flussfunktion und der Quellen bzw. Senken ist innerhalb der Diskretisierung mit der Projektion auf kompatible Polynomräume verbunden und ermöglicht so die Erhaltung des geostrophischen bzw. hydrostatischen Gleichgewichtes auch mit linearen Polynomen als Basisfunktionen der Diskretisierung. Damit ist das Verfahren für die betrachteten Testfälle auch ohne sogenannte Slope-Limiter als zwischengeschaltete Filter stabil und arbeitet zuverlässig mit einem empirisch begründeten CFL-Kriterium in einem weiten Bereich von Auflösungen. Die für das homogene Gleichungssystem ohne Quellen und Senken belegte Konvergenzordnung von $k + 1$ wurde ebenfalls empirisch für das modifizierte Verfahren mit $k = 1$ bestätigt. Ein weiterer Effekt der Stabilisierung ist die weitgehende Vermeidung von ungewünschten Unstetigkeiten in der Darstellung glatter atmosphärischer Zustände.

Das entwickelte stabilisierte DG-Modell reproduziert eine Reihe von Standard-Testfällen der atmosphärischen Dynamik mit Euler- und Flachwassergleichungen in einem weiten Bereich von räumlichen und zeitlichen Skalen. Darunter befindet sich auch die Fortschreibung eines barotrop instabilen Grundstromes in drei Dimensionen als Unterscheidung von folgend betrachteter barokliner Instabilität, dem dominantem Treiber atmosphärischer Variabilität in den mittleren Breiten.

Die Erhaltungseigenschaften von DG sind auch mit den zur Stabilisierung nötigen Modifikationen weiterhin gegeben. Für zukünftige Anwendungen könnte der Einsatz einer Formulierung der Euler-Gleichungen mit totaler Energie als Erhaltungsvariable, wie von Giraldo und Restelli (2008) angeregt, erneut geprüft werden. Damit bezögen sich die strengen Erhaltungseigenschaften zusätzlich zu Masse und Impuls (unter Beeinflussung der wirkenden externen Kräfte) nicht lediglich auf die etwas abstrakte Größe der erhaltenen potentiellen Temperatur. Allerdings ist auch der über längere Zeit integrierte Fehler der Gesamtenergie bisher vernachlässigbar, nicht zuletzt, weil die erhaltene potentielle Temperatur maßgeblich mit der inneren und potentiellen Energie verknüpft ist und die kinetische Energie in der Gesamtbilanz eine untergeordnete Rolle spielt.

Weitere Betrachtungen mit Variation des Polynomgrades $k > 1$ könnten Einblicke in das Wesen der DG-Diskretisierung liefern. In dieser Arbeit wurde der minimale sinnvolle Polynomgrad $k = 1$ und stellenweise auch $k = 2$ betrachtet, während andere Arbeiten

deutlich höhere Grade nutzen, z.B. (Giraldo und Restelli, 2008) mit $k = 10$. Neben Aspekten der numerischen Effizienz ist von Interesse, welche Rolle die entwickelten Anpassungen mit höheren Polynomgraden spielen.

Die Lösung der thermischen Windgleichung entlang der mit den Isobaren identischen charakteristischen Kurven liefert geostrophisch balancierte atmosphärische Zustände mit durch vorgegebenem zonalen Grundstrom einstellbarer Baroklinität. Im Gegensatz zu früheren Arbeiten sind diese Zustände direkt im z -System definiert und müssen nicht aus dem p -System übertragen werden. Mit diesen Zuständen, sowohl als Referenzzustand, von dem lediglich die Abweichungen numerisch betrachtet werden, und insbesondere auch als Startzustand, der einer kleinen Störung unterliegt, konnten verschiedene Studien der Simulation von barokliner Instabilität durchgeführt werden.

Barotrope und barokline Instabilität von vorgegebenen Gleichgewichtszuständen konnte detailliert untersucht werden. Hervorzuheben ist dabei die durch die Formulierung von Grundströmen mit einstellbarer Baroklinität ermöglichte simulationsgestützte Studie des Grades der baroklinen Instabilität verschiedener Wellenlängen in Abhängigkeit von statischer Stabilität und vertikalem Windgradient als Entsprechung zu Stabilitätskarten aus theoretischen Betrachtungen in der Literatur.

Auch die Entwicklung instabiler Grundströme mit verschiedener Baroklinität über zwei Jahre wurde bis hin zum Wellenspektrum aus Wavelet-Analyse untersucht. Eine einfache Randbedingung zur Simulation lateraler Wärmebäder mit fester Temperatur greift dabei einer Erweiterung der modellierten Gleichungen mit Antriebstermen der potentiellen Temperatur vor.

Ein offensichtlicher Schritt für zukünftige Arbeiten ist die Übertragung vom Kanalmodell auf Kugelgeometrie. In der modularen Formulierung des numerischen Verfahrens ist dies grundsätzlich vorgesehen. Für das semi-implizite Zeitschrittverfahren legt bei höherer Anzahl vertikaler Schichten schon der Speicherbedarf nahe, die nur durch direkte Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Elementen geprägte und somit dünn besetzte vertikale Interaktionsmatrix des Präkonditionierers auch als solche optimiert zu behandeln. Man kann sich dabei auch auf bekannte Ansätze konkret für DG-Verfahren, z.B. Persson und Peraire (2006) stützen.

Auch bevor es zum Einsatz als dynamischer Kern eines vollen GCMs kommt, kann eine Version der experimentellen Plattform Polyflux auf der Kugel Ausgangspunkt für weiterführende Simulationen zur Erweiterung des Verständnisses von grundlegenden Wechselwirkungsprozessen der atmosphärischen Dynamik sein. So könnten die formulierten Gleichgewichtszustände um Idealisierungen von Großwetterlagen erweitert werden, deren Stabilität bzw. Mechanismen und Zeitskalen der Instabilität in Bezug auf barokline oder barotrope Mechanismen zu charakterisieren sind.

Naheliegender ist aber auch die global oder nur adaptiv lokal hochaufgelöste Simulation nichthydrostatischer globaler Dynamik, die mit der Unterstützung für unstrukturierte Gitter möglich ist. Prinzipiell ermöglicht dies die Formulierung von konsistenten Modellen, die globale Zirkulation in beidseitiger Wechselwirkung mit lokal aufgelösten Prozessen betrachten. Dies stellt einen Fortschritt zur regionalen Modellierung dar, die nur einseitige Einwirkung eines globalen Modells kennt.

A. Mathematische Aspekte

A.1. Profilkfunktionen

Eindimensionale normierte Profilkfunktionen $\zeta(x)$ dienen als Bausteine für die Definition von Verläufen von Variablen wie Windgeschwindigkeit oder Temperatur sowie auch Störungen dieser. Ebenso werden mit ihrer Hilfe Orographie und adaptive Gitterauflösung definiert. Die vielfältige Verwendung des Konzeptes dieser Profilkfunktionen begründet die Beschreibung dieser in einem eigenen kurzen Kapitel.

Mehrdimensionale Verläufe können auf einfache Weise aus den eindimensionalen kombiniert werden. So sind ein eindimensionales Bodenwindprofil $u_B(y)$ oder auch ein Wind $u(y, z)$ in Breite und Höhe über

$$u_B(y) = u_0 \zeta(y) \quad (\text{A.1})$$

$$u(y, z) = u_0 \zeta_y(y) \zeta_z(z) \quad (\text{A.2})$$

gegeben, wodurch auch Ableitungen und mitunter auch analytische Stammfunktionen automatisch durch die vordefinierten Profilkfunktionen folgen.

Neben den analytischen inneren Profilen $l(s)$ besteht ein Profil zusätzlich aus einer Einschränkung des inneren Verlaufs auf einen Teilbereich des abzudeckenden Intervalls (z.B. Breite des Kanals) mit konstanter Fortsetzung des Wertes oder Setzen auf null außerhalb dieses Bereiches. Das analytische Profil $l(s)$ wird mit der lokalen Koordinate s im eingeschränkten Bereich aus Gesamtlänge L_x zwischen aL_x und bL_x definiert, ergänzt um einen Periodenfaktor d zur Dehnung bzw. Stauchung des Profils und einer Phasenverschiebung h für periodischen Funktionen,

$$s(x) = d \frac{x/L - a}{b - a} - h \quad (\text{A.3})$$

$$\zeta(x) = \left\{ \begin{array}{ll} x/L < A : & cl(-h) \\ A < x/L < B : & l(s(x)) \\ x/L > B : & cl(d - h) \end{array} \right\} \forall c \in \{0; 1\} \quad (\text{A.4})$$

mit $c = 0$ für genullte und $c = 1$ für konstante Fortsetzung. Die effektiven Grenzen A und B können unabhängig von a und b gesetzt werden, je nach Anwendung kann

$$A = a \wedge B = b \quad (\text{A.5})$$

zur absoluten Eingrenzung oder

$$A = -\infty \wedge B = \infty \quad (\text{A.6})$$

zur unendlichen Fortsetzung der analytischen Form unter Beibehaltung des Verlaufes zwischen aL_x und bL_x . Insbesondere ist dies geboten, wenn formulierte Felder im gesamten Modellgebiet und auch darüber hinaus als mehrfach stetig differenzierbar gefordert sind.

Sofern $l(s)$ differenzierbar ist, sind Ableitungen des Profils entsprechend gegeben, die erste Ableitung gemäß

$$\frac{ds}{dx}(x) = \frac{d}{L_x(b-a)} \quad (\text{A.7})$$

$$\Rightarrow \frac{d\zeta}{dx}(x) = A < \frac{x}{L_x} < B \left\{ \begin{array}{l} ? \\ \vdots \\ 0 \end{array} \right. \frac{dr}{ds}(s(x)) \frac{ds}{dx}(x) \quad (\text{A.8})$$

und die zweite gemäß

$$\frac{d^2s}{dx^2}(x) = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\zeta}{dx^2}(x) = A < \frac{x}{L_x} < B \left\{ \begin{array}{l} ? \\ \vdots \\ 0 \end{array} \right. \frac{d^2r}{ds^2}(s(x)) \left(\frac{ds}{dx}(x) \right)^2 \quad (\text{A.10})$$

Einige innere Profilfunktionen und ihre Ableitungen sind in Tab. A.1 aufgelistet. Diese Profile ermöglichen die Aufstellung von Verläufen mit grundsätzlichen Eigenschaften, von konstantem (const) über linear steigenden Verlauf (line) und symmetrisches Maximum (quad) bis zur gezielten Hinzunahme von Wendepunkten (qsine).

Das erste Integral des Gesamtprofils folgt für integrierbare innere Profilfunktionen durch

$$\frac{dx}{ds} = \frac{L_x(b-a)}{d} \quad (\text{A.11})$$

$$\hat{l}(s) := \int_0^s l(s') ds'; \quad \hat{\zeta}(x) := \int_0^x \zeta(x') dx' \quad (\text{A.12})$$

$$d \neq 0 \Rightarrow \hat{\zeta}(x) = \begin{cases} x/L_x < A : & cl(-h)x \\ A < x/L_x < B : & cl(-h)aL_x + \frac{dx}{ds} \hat{l}(s(x)) \\ x/L_x > B : & cl(-h)aL_x + \frac{dx}{ds} \hat{l}(1) \\ & + cl(d-h)(x - bL_x) \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

$$d = 0 \Rightarrow l(x) = l(-h) = \text{const} \quad (\text{A.14})$$

$$\wedge \hat{\zeta}(x) = \begin{cases} x/L_x < A : & cl(-h)y \\ A < x/L_x < B : & cl(-h)aL + l(-h)(x - aL_x) \\ x/L_x > B : & cl(-h)aL_x + l(-h)(b-a)L_x \\ & + cl(-h)(x - bL_x) \end{cases}, \quad (\text{A.15})$$

das zweite Integral mit

$$\hat{\hat{l}}(s) := \int_0^s \int_0^{s'} l(s'') ds'' ds'; \quad \hat{\hat{\zeta}}(x) := \int_0^x \int_0^{x'} \zeta(x'') dx'' dx' \quad (\text{A.16})$$

$$d \neq 0 \Rightarrow \hat{\hat{\zeta}}(x) = \begin{cases} x/L_x < A : & \frac{cl(-h)}{2} x^2 \\ A < x/L_x < B : & \frac{cl(-h)}{2} (aL_x)^2 + \left(\frac{dx}{ds} \right)^2 \hat{\hat{l}}(s(y)) \\ x/L_x > B : & \frac{cl(-h)}{2} (aL_x)^2 + \left(\frac{dx}{ds} \right)^2 \hat{\hat{l}}(1) \\ & + cl(d-h) \left(\frac{1}{2} x^2 - bL_x x \right) \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

$$d = 0 \Rightarrow \hat{\hat{\zeta}}(x) = \begin{cases} x/L_x < A : & \frac{cl(-h)}{2} x^2 \\ A < x/L_x < B : & \frac{cl(-h)}{2} (aL_x)^2 + \frac{l(-h)}{2} (y^2 - (aL)^2) \\ x/L_x > B : & \frac{cl(-h)}{2} (aL_x)^2 + \frac{l(-h)}{2} (b^2 - a^2) L_x^2 \\ & + cl(-h) \left(\frac{1}{2} x^2 - bL_x x \right) \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

| Kürzel | $l(s)$ | $\frac{dl}{ds}(s)$ | $\frac{d^2l}{ds^2}(s)$ |
|--------|--|--|--|
| const | 1 | 0 | 0 |
| line | s | 1 | 0 |
| quad | $-4s^2 + 4s$ | $-8s + 4$ | -8 |
| sine | $\sin(2\pi s)$ | $2\pi \cos(2\pi s)$ | $-4\pi^2 \sin(2\pi s)$ |
| qsine | $\sin^2(\pi s) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2\pi s))$ | $\pi \sin(2\pi s)$ | $2\pi^2 \cos(2\pi s)$ |
| gauss | $e^{-w(s-\frac{1}{2})^2}$ | $-2w \left(s - \frac{1}{2}\right) e^{-w(s-\frac{1}{2})^2}$ | $\left(-2w + 4w^2 \left(s - \frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot e^{-w(s-\frac{1}{2})^2}$ |
| hill | $\frac{w^2}{w^2 + \left(s - \frac{1}{2}\right)^2}$ | $-\frac{2w^2 \left(s - \frac{1}{2}\right)}{\left(w^2 + \left(s - \frac{1}{2}\right)^2\right)^2}$ | $\frac{8w^2 \left(s - \frac{1}{2}\right)^2}{\left(w^2 + \left(s - \frac{1}{2}\right)^2\right)^3} - \frac{2w^2}{\left(w^2 + \left(s - \frac{1}{2}\right)^2\right)^2}$ |

Tabelle A.1.: Profilfunktionen mit Ableitungen, wie sie für Initialzustände, Störungen oder auch Orographie eingesetzt werden, mit der als „Versiera der Agnesi“ bzw. „Witch of Agnesi“ bekannten Kurve als Hügelform (hill) mit Breitenparameter w , wie auch die allgemeine Gaußkurve

Einige Integrale für betreffende innere Profile sind in Tab. A.2 zu finden. Diese werden zur Definition analytischer Zustände auf Basis von Bodenwindprofilen benötigt. Wie schon angedeutet, bilden diese Profilfunktionen generell eine flexible Grundlage für die Definition von Referenzfeldern und Anfangszuständen inklusive Störungen. Darüber hinaus kann mit ihrer Hilfe auch analytische Orographie konfiguriert werden.

| Kürzel | $l(s)$ | $\hat{l}(s)$ | $\hat{\hat{l}}(s)$ |
|--------|---|--|--|
| const | 1 | s | $\frac{1}{2}s^2$ |
| line | s | $\frac{1}{2}s^2$ | $\frac{1}{6}s^3$ |
| quad | $-4s^2 + 4s$ | $-\frac{4}{3}s^3 + 2s^2$ | $-\frac{1}{3}s^4 + \frac{2}{3}s^3$ |
| qsine | $\sin^2(\pi s) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2\pi s))$ | $\frac{1}{2} \left(s - \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi s)\right)$ | $\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}s^2 + \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \cos(2\pi s)\right)$ |
| sine | $\sin(2\pi s)$ | $-\frac{1}{2\pi} \cos(2\pi s)$ | $-\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \sin(2\pi s)$ |

Tabelle A.2.: Einige Profilfunktionen mit ihren analytischen Integralen, die zur Definition von balancierten Windfeldern dienen.

A.2. Differenzen und Normen

Globale Differenzen, speziell zur Quantifizierung der Abweichung von Anfangs- oder Referenzzustand, werden aus der Basisdarstellung der konservierten Variablen durch \mathcal{L}^1 - oder \mathcal{L}^2 -Integralnormen bestimmt. Die Formulierung hier bezieht sich auf eine allgemeine Variable $\vartheta(\vec{x}, t)$ und das potentiell zeitabhängige Referenzfeld $\vartheta_0(\vec{x}, t)$, zu dem eine Differenz ausgewertet werden soll. Die Integration wird praktisch per Quadratur mit erhöhtem Polynomgrad und in der DG-Darstellung bezogen auf die Elemente der Referenz ausgewertet. Das Symbol $d(\cdot, \cdot)$ steht allgemein für eine Differenz, ohne die zu Grunde liegende Norm zu bestimmen.

Mit der \mathcal{L}^1 -Norm ist ein Maß für die globale Differenz durch das Integral der Absolutbeträge der Differenzen

$$d(\vartheta, \vartheta_0, t) = \int_{\Omega} |\vartheta - \vartheta_0| d^n x \quad (\text{A.19})$$

gegeben, mit der \mathcal{L}^2 -Norm ist es

$$d(\vartheta, \vartheta_0, t) = \sqrt{\int_{\Omega} (\vartheta - \vartheta_0)^2 d^n x} . \quad (\text{A.20})$$

Bei der \mathcal{L}^1 -Norm folgt aus der Integration einer Raumdichte die passende physikalische Dimension (Masse bei Integration von ρ in 3D) und auch ist es so möglich, einen mittleren Fehler der Dichte

$$\vartheta_{\text{mean}}(\vartheta, \vartheta_0) = \frac{d(\vartheta, \vartheta_0)}{d(1, 0)} = \frac{\int_{\Omega} |\vartheta - \vartheta_0| d^n x}{\int_{\Omega} 1 d^n x} \quad (\text{A.21})$$

einfach durch Division mit dem Volumen anzugeben. Bei der \mathcal{L}^2 -Norm müsste die physikalische Dimension der Quadratwurzel eines inversen Volumens diskutiert werden.

Irrelevant ist dies Problematik der physikalischen Dimensionen für relative Fehler

$$d_{\text{ref}}(\vartheta, \vartheta_0) = \frac{d(\vartheta, \vartheta_0)}{d(\vartheta_0, 0)} \quad (\text{A.22})$$

als das Verhältnis der Fehlernorm zur Norm des Referenzfeldes selbst (gleich Differenz zu null). Hier wird generell der üblicheren \mathcal{L}^2 -Norm der Vorzug gegeben, die je nach Charakter der Daten Unterschiede in der Gewichtung von Abweichungen zur \mathcal{L}^1 -Norm aufweist, aber qualitativ keinen Unterschied darstellt. Prinzipiell hat die \mathcal{L}^2 -Norm den Vorteil exakter Quadratur¹ (Produkt zweier Polynome anstatt Betragsfunktion), aber auch bei sehr geringen Elementzahlen lässt sich die \mathcal{L}^1 -Norm hinreichend gut durch die Quadraturregeln für doppelten Basisgrad — wie sie auch bei der \mathcal{L}^2 -Norm zum Einsatz kommen — nähern.

Der Differenz von Vektorfeldern, speziell der Impulsdichte, gebührt ebenfalls Augenmerk. Man kann Normen der Abweichungen der Komponenten erfassen. So ist ein integrierter Vektor der Abweichung aus diesen konstituiert,

$$\vec{d}(\vec{U}, \vec{U}_0) = \vec{e}_i d(U_i, U_{0i}) . \quad (\text{A.23})$$

Der euklidische Betrag dieses Fehlervektors gibt ein skalares Maß für die Stärke der vektoriellen Abweichung,

$$d(\vec{U}, \vec{U}_0) = \|\vec{d}(\vec{U}, \vec{U}_0)\|_2 = \sqrt{\sum_i (d(q_i, U_{0i}))^2} . \quad (\text{A.24})$$

¹ unter Vernachlässigung lokaler Raumverzerrung

Dies kann wieder mit dem Gesamtvolumen oder der entsprechenden Referenznorm skaliert werden.

Die Skalierung mit der Referenz ergibt generell eine dimensionslose Zahl als relative Abweichung, die sich als kontextfreies Maß gut verwenden lässt. Eine unskalierte Differenz trägt physikalisch die Dimension, von der ϑ eine Dichte darstellt. Es ist eine Masse, wenn ϑ die Massendichte ist. Es ist ein Impuls, wenn \vec{U} eine Impulsdichte ist. Hier ist die Skalierung mit dem Volumen sinnvoll — speziell, da der Referenzimpuls gleich null sein kann — um vergleichbare Werte einer Abweichung der Impulsdichte zu erhalten.

A.3. Wavelet-Analyse

Die in Kap. 7 verwendete Wavelet-Analyse soll hier kurz umrissen sein, der Darstellung von Torrence und Compe (1998) folgend. Auf statistische Signifikanzen wurde verzichtet, da nicht die detaillierte quantitative Vergleiche im Vordergrund stehen, sondern ein Überblick auf das Spektrum mit Diagnose der dominanten Frequenzen und deren Entwicklung mit der Zeit. Die skalenunabhängige Wavelet-Analyse ist hier im Vergleich zur Fourieranalyse mit einem Fenster bestimmter Größe im Vorteil.

Grundbaustein der verwendeten Wavelet-Analyse sind Morlet-Wavelet-Funktionen der Form

$$\psi_0(\eta) = \pi^{-1/4} e^{i\omega_0\eta} e^{-\eta^2/2} \quad (\text{A.25})$$

mit dimensionsloser Zeitvariable η und dimensionsloser Frequenz ω_0 , in dieser Arbeit festgelegt auf

$$\omega_0 = 7. \quad (\text{A.26})$$

Für die qualitative Übersicht im Wavelet-Leistungsspektrum ist die detaillierte Wahl des Basis-Wavelets nicht wesentlich. Wichtig ist, dass es sich um eine in Zeit und Frequenz lokalisierte Funktion mit verschwindendem Mittelwert handelt. Beide Eigenschaften deuten sich in der Darstellung von ψ_0 in Abb. A.1 an.

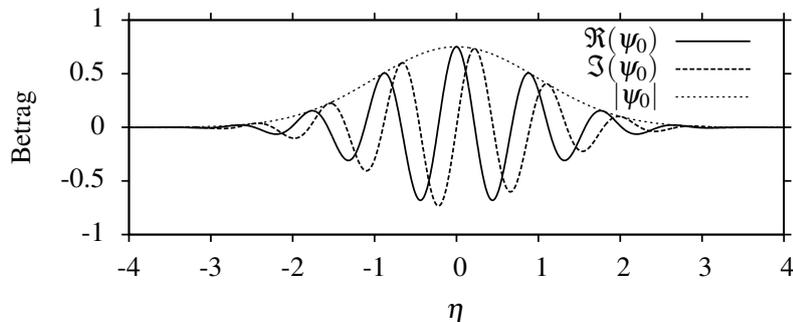


Abbildung A.1.: Ansicht von Real- und Imaginärteil sowie Absolutbetrag des unskalierten Morlet-Wavelets mit $\omega_0 = 7$.

Die Wavelet-Transformation W einer diskreten Zeitreihe x_n einer Messgröße mit fester Schrittweite Δt und N Elementen (von x_0 bis x_{N-1}) ist durch die Faltung der Zeitreihe mit dem komplexen Konjugat ψ^* von skalierten und verschobenen Versionen ψ des Mutter-Wavelets ψ_0 gegeben,

$$W_n(s) = \sum_{n'=0}^{N-1} x_{n'} \psi^* \left(\frac{(n' - n)\Delta t}{s} \right). \quad (\text{A.27})$$

Die Wahl von n lokalisiert die Stärke von verschiedenen Wavelet-Zeitskalen s um einen Punkt der Zeitreihe x_n . Aus diesen beiden Parametern ergibt sich das zweidimensionale

Bild des Wavelet-Spektrums von aktiven Wellen-Zeitskalen (y -Achse) im Verlauf der Zeit (x -Achse). Die komplexe Transformation enthält Amplituden- und Phaseninformation. Das Leistungsspektrum $P(n, s)$ wird durch den Betrag des komplexen Wertes gebildet:

$$P(n, s) = |W_n(s)|^2 . \quad (\text{A.28})$$

Zur internen Vergleichbarkeit der Leistungsspektren sind die genutzten ψ in der Energie für alle Skalen (s) auf eins normiert. Die Darstellungen in Abb. 7.4(a) und Abb. 7.24 zeigen jeweils $P(n, s)$ als zweidimensionale Farbkarten.

A.4. Darstellung aus der Diskretisierung

Bei der Übertragung von Datensätzen aus DG-Diskretisierung an generische Werkzeuge zur Darstellung ohne Anpassungen an die Struktur der Modelldaten, z.B. das in dieser Arbeit verwendete freie Programm Gnuplot (Janert et al., 2009), ist Vorsicht geboten: Abtastungen, die die Darstellung im Basisraum in Gitterpunktdarstellung überführen, können nicht nur durch Unterschreitung der bereits von Shannon (1949) beschriebenen minimalen Abtastrate für die beinhalteten Strukturen einen falschen Eindruck liefern. Es ist auch darauf zu achten, dass die Abtastgitter so gestaltet sind, dass z.B. sie keine künstlichen Trends suggerieren, wie es Abb. A.2 für einen un stetigen Datensatz demonstriert.

Die Datenquelle besteht in einer lokalen Gleichgewichtsstörung (entstanden während Untersuchungen zur in Kap. 5 behandelten Problematik), die keinen globalen Trend aufweist. Ungünstige Abtastung suggeriert aber einen solchen. Die Polynome der DG-Darstellung² müssen entweder hinreichend genau lokal — insbesondere inklusive der Elementgrenzen — oder zumindest ohne systematische Verschiebung innerhalb aufeinander folgender Elemente abgetastet sein.

Die Abtastung an Elementmittelpunkten (siehe Abb. 3.2) entspricht bei $k \leq 1$ der Mittelwertbildung und ist dort ein guter Ansatz, eine geglättete Darstellung ohne weitere Artefakte zu erreichen. Diese Glättung ist auch geboten, wenn ein in der Fluidodynamik üblicher Graph mit Isolinien gewünscht ist. Allerdings reduziert die in Kap. 5 formulierte Modifikation des DG-Verfahrens auftretende Unstetigkeiten auf ein Minimum, so dass

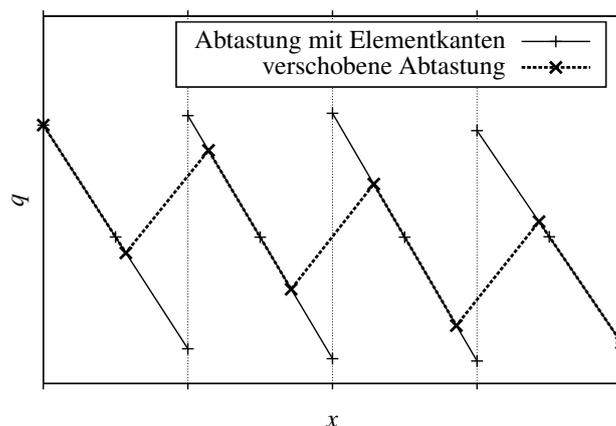


Abbildung A.2.: Vortäuschung von globalem Trend einer Variable q in Koordinate x durch verschobene Abtastung, im Kontrast zu einer, die die Elementgrenzen (angedeutet durch koordinatengitter) einbezieht

² bzw. abgeleitete Größen wie Wind aus Impulsdichte, welche i.A. einem polynomialen Verlauf sehr nahe sind

dieses Problem der Darstellung weniger präsent ist. Was aber bleibt, sind insbesondere bei Polynomgrad $k = 1$ unstetige Ableitungen auch von an Elementgrenzen stetigen Feldgrößen.

So sind ungefilterte Darstellung der Vorticity als Ableitungsgröße der Windgeschwindigkeiten³ künstlich mit Unstetigkeiten versehen, die unnötig die Interpretation erschweren. Abhilfe zum Zwecke der Darstellung schafft die Definition der Ableitungen in numerischer Form aus den Abtastungen der Hauptgrößen fern der Elementgrenzen. Auch bei unregelmäßigen Abtastungen liefert die Methode der zentralen Differenzen,

$$\frac{d\vartheta(x)}{dx} \approx \frac{(\vartheta(x+w) - (1 - (w/v)^2)\vartheta(x) - (w/v)^2\vartheta(x-v))}{w(1 + w/v)} \quad (\text{A.29})$$

(mit den drei Punkten $x - v$, x und $x + w$, gewichtetes Mittel der beidseitigen Differenzen für allgemeinen Fall $w \neq v$, an Rändern nur einseitige Differenz) gute Ergebnisse. Generell sind auf eigenständiger Diskretisierung basierende Abbildungen immer eine Näherung an die im Modell wirksamen Größen, womit die Behandlung der Ableitung kein Sonderfall ist.

A.5. Erhaltungseigenschaften mit Quadratur

In Abhängigkeit von Nichtlinearitäten der Flussfunktion und der Eigenschaften der Koordinatentransformation ist die Näherung der analytischen Integrale in Gl. 3.1 bzw. Gl. 3.15 durch Quadratursummen nach Abs. 3.1.4 im Allgemeinen mit einem Fehler behaftet. Die Erhaltungseigenschaften der mit Quadratur diskretisierten Darstellung sind allerdings unabhängig von der Qualität der Quadratur. Das verdeutlicht die globale Betrachtung von Gl. 3.15, Dabei bleibt die Betrachtung bei der einzelnen Variable v .

Ein Zwischenschritt für diese ist die Zusammenlegung der Grenzflächenintegrale über eine Fläche Γ_E ausgehend von den beiden angrenzenden Elementen E_1 und E_2 mit diesseitigen Werten φ_1 und φ_2 sowie den Normalenvektoren $\vec{v}_1 = -\vec{v}_2$,

$$\int_{\Gamma_E} \hat{f} \varphi_1 \vec{v}_1 \, d\sigma + \int_{\Gamma_E} \hat{f} \varphi_2 \vec{v}_2 \, d\sigma = \int_{\Gamma_E} \hat{f} (\varphi_1 - \varphi_2) \vec{v}_1 \, d\sigma = \int_{\Gamma_E} \hat{f} \llbracket \varphi \rrbracket \, d\sigma . \quad (\text{A.30})$$

Ohne Unterscheidung von äusseren und inneren Rändern (Randbedingungen erzeugen virtuelle Elemente auf der Außenseite) lässt sich so Gl. 3.15 auf das gesamte Modellgebiet Ω mit der Vereinigung der Grenzflächen Γ beziehen,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} r_{\vartheta} \varphi \, d^n x &= \int_{\Omega} (\partial_t v) \varphi \, d^n x + \int_{\Gamma} \hat{f}_{\vartheta} \cdot \llbracket \varphi \rrbracket \, d\sigma \\ &\quad - \int_{\Omega} \vec{f}_{\vartheta} \cdot \nabla \varphi \, d^n x . \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

In der Darstellung mit Quadratur lautet dies (mit Flussfunktion als Funktion des Ortes, letztlich indirekt über $\vec{q}(\vec{x})$)

$$\begin{aligned} \sum_i w_i r_{\vartheta} \varphi(\vec{x}_i) &= \sum_i w_i (\partial_t v(\vec{x}_i)) \varphi(\vec{x}_i) + \sum_j w_j \hat{f}_{\vartheta}(\vec{x}_j) \cdot \llbracket \varphi \rrbracket_{x_j} \\ &\quad - \sum_i w_i \vec{f}_{\vartheta}(\vec{x}_i) \cdot \nabla \varphi(\vec{x}_i) . \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

³ mit den Polynomen der Dichte und des Impulses dargestellt

Dieser Ansatz gilt unabhängig von der Wahl des φ — es müssen nicht lokalisierte Basisfunktionen sein. Wählt man das global konstante Polynom nullten Grades $\varphi(\vec{x}) = 1$, so fallen die Summen mit Gradienten und Sprung von φ heraus und es bleibt

$$\sum_i w_i \partial_t \vartheta(\vec{x}_i) = \sum_i w_i r_{\vartheta} . \quad (\text{A.33})$$

Dies bedeutet nichts anderes, als dass das Integral (gewichtete Summe) der zeitlichen Änderungen der Größe (Dichte) v gleich dem Integral (Summe) der global wirkenden Quellterme ist. Gibt es keine Quellen und Senken, ist das Integral der Variablen eine globale Konstante.

Diese grundlegende Eigenschaft ist völlig unabhängig von der speziellen Ausgestaltung des Integrals bzw. der Quadratursumme, solange sie für eine Nullfunktion (Gradienten und Sprünge der global Konstanten Funktion) auch eine Nullsumme errechnet. Die Konstanz des Integrals der Massendichte ρ definiert den Begriff der Massenerhaltung, ebenso für beliebige andere Erhaltungsvariablen.

Randbedingungen wurden in dieser einfachen Betrachtung nicht berücksichtigt. Es ist offensichtlich, dass bestimmte Randbedingungen wie die Absorptionsschicht (Abs. 3.3.4) gezielt die Erhaltungseigenschaften außer Kraft setzten. Wird die Variable nicht durch Randbedingungen oder externe Kräfte gestört, so ist ihr Integral unabhängig von der Quadratur-Genauigkeit erhalten.

B. Details zu Euler-Gleichungen

B.1. Vertikale Linearisierung der Euler-Gleichungen für Präkonditionierer des semi-impliziten Zeitschrittes

Für die sinnvolle Anwendung der semi-impliziten Zeitintegration (Abs. 3.2.2) ist ein Präkonditionierer für die Lösung des linearen Gleichungssystems notwendig, um die Anzahl der GMRES-Iterationen mit Auswertung des vollen linearisierten Gleichungssystems Gl. 2.47 zu reduzieren. Es bietet sich die Matrixformulierung der vertikalen Prozesse in einer Säule an, deren Invertierung zur Laufzeit angewendet werden kann. Da diese Komponente auch in einem auf die Kugel angewendeten Modell benötigt wird, erfolgt die recht aufwändige Formulierung hier sofort für den allgemeinen Fall mit n Dimensionen sowie ortsabhängiger Vertikalrichtung $\vec{k} = \vec{k}(\vec{x})$ mit Komponente $k_i = \vec{k} \cdot \vec{e}_i$. Auch wird die Unterstützung von Kanalkonfigurationen in 1D, 2D oder 3D durch die allgemeine Behandlung des Vertikalvektors erleichtert.

Die allgemeine Darstellung enthält für die Anwendung im Euler-Kanal mit festem Vertikalvektor unnötige (von Nullen gefüllte) Matrizen. Dies fällt aber praktisch bei der Umsetzung mit dichten Matrizen und der folglich Beschränkung der vertikalen Auflösung nicht ins Gewicht, auch weil dabei der Anteil des Präkonditionierers an der Rechenzeit gering ist. Erst bei hohen vertikalen Auflösungen ist in der Formulierung mit dichten Matrizen ein Einfluss der Deaktivierung der unnötigen Matrizen merkbar. Optimierung der Umsetzung auf dünne Matrizen sollte aber auch diesen Aspekt abdecken.

Zweck der Formulierung ist die Behandlung schneller, dominante Dynamik. Daher ist Diffusion, welche in bestimmter Formulierung auch in der Linearisierung betrachtet werden könnte, außen vor. Absorptionsschichten sind allgemein kein Teil der Linearisierung.

B.1.1. Vertikales lineares Gleichungssystem

Basis des Prädiktionierers ist ein linearisiertes Gleichungssystem,

$$\partial_t \vec{q} + \overleftrightarrow{\nabla} \vec{l} = \vec{r} \quad (\text{B.1})$$

mit linearisiertem Fluss \vec{l} und als linear angenommener rechter Seite \vec{r} . Der numerische Fluss wird mit der vertikalen Komponente der jeweiligen Grenzflächennormalen skaliert,

$$\hat{\vec{l}} = \{ \vec{l} \} + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket \vec{q} \rrbracket . \quad (\text{B.2})$$

Damit dieser auch eine lineare Funktion darstellt, darf die Signalgeschwindigkeit λ_s nicht vom veränderlichen \vec{q} abhängen,

$$\lambda_s = \lambda_s(\vec{q}_0) . \quad (\text{B.3})$$

Konkret wird für die Euler-Gleichungen, auf die sich weitere Betrachtungen exklusiv beziehen, die die lokale Schallgeschwindigkeit aus dem Referenzfeld verwendet, Advektion also vernachlässigt. Für entsprechendem Referenzfeld aber könnte sie aber auch eingebunden werden.

Die vertikale Dynamik wird durch Reduktion des wirkenden Impulses auf die vertikale Komponente,

$$\vec{W} = (\vec{U} \cdot \vec{k}) \vec{k} , \quad (\text{B.4})$$

sowie Berücksichtigung der nur vertikalen Kräfte in Gl. 2.47 beschrieben,

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \Theta \\ U^1 \\ \vdots \\ U^d \end{pmatrix} + \overleftrightarrow{\nabla} \begin{pmatrix} \vec{W}^T \\ \frac{\Theta_0}{\rho_0} \vec{W}^T \\ p_\theta \Theta k_1 \vec{e}_1^T \\ \vdots \\ p_\theta \Theta k_d \vec{e}_d^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\rho g k_1 \\ \vdots \\ -\rho g k_d \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Zur besseren Unterscheidung von Indizes zu Basisfunktionen sind die Impulskomponenten \vec{U}^j per hochgestelltem Index unterschieden. Generell sind in diesem Abschnitt hochgestellte Indizes nicht mit Potenzierungen zu verwechseln. Die einzige vorkommende Potenz ist die von Matrizen mit -1 , um Invertierung anzuzeigen.

B.1.2. Auswertung in Diskretisierung und Formulierung in Matrizen

Es wird eine Indizierung der für die Säule relevanten K globalen Basisfunktionen φ_η bzw. φ_ζ verwendet. Die mit der Massematrix¹ versehenen Terme in Gl. 3.22 werden durch

$$\varphi_\eta^M = (\overline{M}^{-1} \vec{\varphi})_\eta \quad (\text{B.6})$$

abgekürzt. In der Umsetzung als Computerprogramm sind Basisfunktionen und auch die Gradienten im Element entsprechend dieser Form gespeichert. Die Massematrix \overline{M} kommt darüber hinaus nicht vor.

Als Kurzform für die Gesamtheit aller Koeffizienten zu allen Variablen dient \vec{q} , mit

$$\vec{q}^\theta = \vec{\vartheta} \quad (\text{B.7})$$

¹ ebenfalls in ihrem Ausschnitt für die Säule

als Alias für den Koeffizientenvektor zur Variable ϑ als Unterblock von \vec{q} (hochgestellter Index zur Trennung von tiefem Index, der eine Komponente dieses Koeffizientenvektors adressiert). Der Systemvariablenvektor \vec{q} ist zu trennen von seiner Darstellung als Koeffizienten \bar{q} . In \vec{q} ist die Auswertung mit den Basisfunktionen durchgeführt, während \bar{q} isoliert die Koeffizienten bezeichnet.

Die Auswertung der diskretisierten Zeitableitung Gl. 3.22 mit dem linearisierten Gleichungssystem ergibt eine lineare Abbildung

$$\vec{L}(\vec{q}) = \frac{d}{dt} \vec{q}, \quad (\text{B.8})$$

bzw. in Bezug auf die Koeffizienten

$$\bar{L}(\bar{q}) = \frac{d}{dt} \bar{q}, \quad (\text{B.9})$$

deren Auswertung auch mit der Anwendung einer Matrix \bar{L} dargestellt werden kann. Folgend ist diese lineare Abbildung für die Euler-Gleichungen ausgeführt, dabei nach Systemvariablen getrennt betrachtet.

Ein weiterer Aspekt der Diskretisierung ist die in Kap. 5 ausgeführte Modifikation der Quellterme. Es bleibt allerdings bei der Glättung von \vec{r} . Zusätzliche Flussbalancierung könnte noch eingebunden werden, aber es reicht, wenn der Prädiktionierer eine gewisse Näherung and das gesamte lineare Gleichungssystem darstellt. Die volle Balancierung wird im vollen linearen Gleichungssystem bei der iterativen Lösung mit GMRES eingesetzt.

Die Polynomgradreduktion Gl. 5.4 wird um eine weitere Projektion zurück in den ursprünglichen Basisraum ergänzt, um sie als Lineare Abbildung \bar{T} in der einheitlichen Basisdarstellung darzustellen:

$$T : \bar{\vartheta} \mapsto \bar{T} \bar{\vartheta}. \quad (\text{B.10})$$

Die Auswertung der linearisierten Zeitableitung der Komponente ϑ_η der Variablen q^ϑ mit Flussvektor \vec{l}^ϑ und Quellterm r_ϑ ist²

$$\frac{d}{dt} \vartheta_\eta = \left(L^\vartheta(\vec{q}) \right)_\eta \quad (\text{B.11})$$

$$= \int_{\Omega} \vec{l}^\vartheta(\vec{q}) \cdot \hat{\nabla} \varphi_\eta^M - \int_{\Gamma} \left(\hat{l}^\vartheta(\vec{q}) \right) \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket + \int_{\Omega} \varphi_\eta^M r_\vartheta(T(\vec{q})) \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \left(\vec{l}^\vartheta(\vec{q}) \right)_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_\eta^M \\ &\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma^0} \left(\hat{l}^\vartheta(\vec{q}) \right)_i \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i - \sum_{i=1}^n \int_{\partial\Omega} \left(\hat{l}^\vartheta(\vec{q}) \right)_i \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i \\ &\quad + \int_{\Omega} \varphi_\eta^M r_\vartheta(T(\vec{q})) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Alle Raumrichtungen werden diskriminierungsfrei gleichartig gerechnet. Mit dem nume-

² Das Integral über Ω bzw. $\partial\Omega$ und Γ^0 wird ohne Spezifizierung des Volumens $d^n x$ bzw. der Fläche $d^{n-1} x$ angedeutet.

rischen Fluss Gl. B.2 steht die Ausgangsform für die detaillierte Auswertung,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \vartheta_\eta &= \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} (\vec{l}^\vartheta(\vec{q}))_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_\eta^M + \int_{\Omega} \varphi_\eta^M r_{\vartheta}(T(\vec{q})) \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma^0} \left(\{ \vec{l}^\vartheta(\vec{q}) \}_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket q^\vartheta \rrbracket_i \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\partial\Omega} \left(\{ \vec{l}^\vartheta(\vec{q}) \}_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket q^\vartheta \rrbracket_i \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i .
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Als Randbedingungen auf $\partial\Omega$ (Ober- und Unterrand der Säule) kommen unveränderte reflektive Randbedingungen zum Einsatz. Die Reflexionen sind dabei nicht auf die Vertikale beschränkt. Damit wird hier von der Prämisse abgewichen, was aber gerechtfertigt ist, da die Formulierung von nur Vertikalimpuls reflektierenden Rändern als Selbstzweck zwar dem Namen des vertikalen Gleichungssystems gerecht werden, aber die Effizienz des Prädiktionierers schmälern.³

Strukturell gibt es drei Klassen von Auswertungen L^ϑ : Eine für die Dichte, eine für die potentielle Temperatur und eine Form für die Impulskomponenten. Diese werden nun nacheinander inklusive Anwendung von Randbedingungen ausformuliert und in den Ausdrücken Matrixoperationen auf die Koeffizienten \vec{q} erkannt. Diese Matrizen sollen anschließend genauer diskutiert und berechnet werden.

Auswertung für Dichte

Einsetzen der ersten Zeile von Gl. B.5 in Gl. B.14 liefert

$$\begin{aligned}
(L^\rho(\vec{q}))_\eta &= \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^n U^j k_j \right) k_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_\eta^M \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma^0} \left(\left(\sum_{j=1}^n \{ U^j \} k_j \right) k_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket \rho \rrbracket_i \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\partial\Omega} \left(\left(\sum_{j=1}^n \{ U^j \} k_j \right) k_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \underbrace{\llbracket \rho \rrbracket_i}_{=0} \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i .
\end{aligned} \tag{B.15}$$

Wegen der vollständigen Reflexion fällt leider nur ein Teil des äußeren Randintegrals weg. Sortieren der Terme inklusive Wiedererkennen des einfachen Skalarproduktes sowie

³ Umstellung von solchen vertikalen Reflexionen auf die volle Form erbrachte deutliche Verbesserung in der Anzahl der nötigen GMRES-Iterationen.

einsetzen von $\{U^j\}$ am Rand führt zu

$$\begin{aligned}
(L^\rho(\vec{q}))_\eta &= \sum_{j=1}^n \left(\int_{\Omega} U^j k_j \vec{k} \cdot \nabla \varphi_\eta^M - \int_{\Gamma^0} \{U^j\} k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right) \\
&\quad - \underbrace{\int_{\Gamma^0} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket \rho \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket}_{(\bar{J}^0 \bar{\rho})_\eta} \\
&\quad - \sum_{j=1}^n \int_{\partial\Omega} \left(U^j - \sum_{m=1}^n U^m v_{E,m} v_{E,j} \right) k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \\
&= \sum_{j=1}^n \dots - (\bar{J}^0 \bar{\rho})_\eta \\
&\quad - \sum_{j=1}^n \int_{\partial\Omega} U^j k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket + \sum_{j=1}^n \int_{\partial\Omega} \sum_{m=1}^n U^m v_{E,m} v_{E,j} k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket .
\end{aligned} \tag{B.16}$$

Ein weiteres Skalarprodukt wird erkannt,

$$\begin{aligned}
(L^\rho(\vec{q}))_\eta &= \sum_{j=1}^n \dots - (\bar{J}^0 \bar{\rho})_\eta - \sum_{j=1}^n \int_{\partial\Omega} U^j k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \\
&\quad + \sum_{m=1}^n \int_{\partial\Omega} U^m v_{E,m} \underbrace{\left(\sum_{j=1}^n v_{E,j} k_j \right)}_{\vec{v}_E \cdot \vec{k}} \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket ,
\end{aligned} \tag{B.17}$$

und ermöglicht es, den Index m zum gemeinsamen j umzudefinieren,

$$\begin{aligned}
\Leftrightarrow (L^\rho(\vec{q}))_\eta &= \sum_{j=1}^n \dots - (\bar{J}^0 \bar{\rho})_\eta - \sum_{j=1}^n \int_{\partial\Omega} U^j k_j (\vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket) \\
&\quad + \sum_{j=1}^n \int_{\partial\Omega} U^j v_{E,j} (\vec{v}_E \cdot \vec{k}) (\vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket) .
\end{aligned} \tag{B.18}$$

Die zusammengefasste Summe ist die Anwendung einer weiteren Matrix,

$$\begin{aligned}
&\quad \overbrace{\left(\bar{D}^j(1) \bar{U}^j \right)_\eta} \\
\Leftrightarrow (L^\rho(\vec{q}))_\eta &= \sum_{j=1}^n \left(\int_{\Omega} U^j k_j \vec{k} \cdot \nabla \varphi_\eta^M - \int_{\Gamma^0} \{U^j\} k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right. \\
&\quad \left. - \int_{\partial\Omega} U^j (k_j - v_{E,j} (\vec{v}_E \cdot \vec{k})) \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right) \\
&\quad - (\bar{J}^0 \bar{\rho})_\eta \\
&= \sum_{j=1}^n \left(\bar{D}^j(1) \bar{U}^j \right)_\eta - (\bar{J}^0 \bar{\rho})_\eta .
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Die \bar{D}^j beinhalten die Advektion inklusive der Reflexion am Rand, während die inneren Sprünge aus dem numerischen Fluss in \bar{J}^0 aufgegangen sind.

Auswertung für erhaltene potentielle Temperatur

Der Ausdruck für die erhaltene potentielle Temperatur ergibt sich völlig analog, aus der zweiten Zeile in Gl. B.5 in Gl. B.14:

$$\begin{aligned}
 (L^\Theta(\vec{q}))_\eta &= \sum_{i=1}^n \int_\Omega \frac{\Theta_0}{\rho_0} \left(\sum_{j=1}^n U^j k_j \right) k_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_\eta^M \\
 &\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma^0} \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \left(\sum_{j=1}^n \{U^j\} k_j \right) k_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket \Theta \rrbracket_i \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i \\
 &\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \left(\sum_{j=1}^n \{U^j\} k_j \right) k_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \underbrace{\llbracket \Theta \rrbracket_i}_{=0} \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i
 \end{aligned} \tag{B.20}$$

Die Ausdrücke sind identisch zu denen für ρ , nur vor jeden Impuls U^j kommt das lokale, räumlich kontinuierliche Gewicht $\frac{\Theta_0}{\rho_0}$. Im Ergebnis steht hier

$$\begin{aligned}
 (L^\Theta(\vec{q}))_\eta &= \sum_{j=1}^n \overbrace{\left(\int_\Omega \frac{\Theta_0}{\rho_0} U^j k_j \vec{k} \cdot \nabla \varphi_\eta^M - \int_{\Gamma^0} \frac{\Theta_0}{\rho_0} \{U^j\} k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right.} \\
 &\quad \left. - \int_{\partial\Omega} \frac{\Theta_0}{\rho_0} U^j (k_j - v_{Ej} (\vec{v}_E \cdot \vec{k})) \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right) \\
 &\quad - (J^0 \bar{\Theta})_\eta \\
 &= \sum_{j=1}^n \left(\bar{D}^j \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \bar{U}^j \right)_\eta - \left(\bar{J}^0 \bar{\Theta} \right)_\eta .
 \end{aligned} \tag{B.21}$$

Auswertung für Impulse

Eine Impulskomponente U^j erfährt Wirkung aus Druckgradientenkraft und Erdanziehung und zusätzlich die Reflexion am Rand. Eine Impulszeile aus Gl. B.5 in Gl. B.14:

$$\begin{aligned}
 (L^{U^j}(\vec{q}))_\eta &= \sum_{i=1}^n \int_\Omega (p_\theta \Theta k_j \vec{e}_j)_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_\eta^M - \int_\Omega \varphi_\eta^M T(\rho) g k_j \\
 &\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma^0} \left((p_\theta \{ \Theta \} k_j \vec{e}_j)_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket_i \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i \\
 &\quad - \sum_{i=1}^n \int_{\partial\Omega} \left((p_\theta \{ \Theta \} k_j \vec{e}_j)_i + \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket_i \right) \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_i .
 \end{aligned} \tag{B.22}$$

Mit etwas Vereinfachung für $i \neq j$, das bekannte Skalarprodukt sowie der Randwert von Θ entwickelt sich dies weiter zu

$$\begin{aligned}
 (L^{U^j}(\vec{q}))_\eta &= \int_\Omega p_\theta \Theta k_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_\eta^M - \int_\Omega \varphi_\eta^M T(\rho) g k_j \\
 &\quad - \int_{\Gamma^0} p_\theta \{ \Theta \} k_j \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_j - \int_{\Gamma^0} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \\
 &\quad - \int_{\partial\Omega} p_\theta \Theta k_j \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_j - \int_{\partial\Omega} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket .
 \end{aligned} \tag{B.23}$$

Sortierung der Terme lässt die ersten Matrizen erkennen,

$$\begin{aligned}
&= \int_{\Omega} p_{\theta} \Theta k_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_{\eta}^M - \int_{\Gamma^0} p_{\theta} \{ \Theta \} k_j \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket_j - \overbrace{\int_{\Omega} \varphi_{\eta}^M T(\rho) g k_j}^{(\bar{G}^j T \bar{\rho})_{\eta}} \\
&\quad - \int_{\partial \Omega} p_{\theta} \Theta k_j \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket_j \\
&\quad - \underbrace{\int_{\Gamma^0} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket}_{(\bar{J}^0 \bar{U}^j)_{\eta}} - \int_{\partial \Omega} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket
\end{aligned} \tag{B.24}$$

sowie

$$\begin{aligned}
&= \overbrace{\int_{\Omega} p_{\theta} \Theta k_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_{\eta}^M - \int_{\Gamma^0} p_{\theta} \{ \Theta \} k_j \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket_j - \int_{\partial \Omega} p_{\theta} \Theta k_j \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket_j}^{(\bar{P}^j \bar{\Theta})_{\eta}} \\
&\quad - (\bar{G}^j T \bar{\rho})_{\eta} - (\bar{J}^0 \bar{U}^j)_{\eta} \\
&\quad - \int_{\partial \Omega} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket U^j \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket .
\end{aligned} \tag{B.25}$$

Die Randsprünge bewirken die Kopplung aller Impulskomponenten und führen so zur letzten Matrixdefinition in der Auswertung,

$$\begin{aligned}
(L^{U^j}(\vec{q}))_{\eta} &= (\bar{P}^j \bar{\Theta})_{\eta} - (\bar{G}^j T \bar{\rho})_{\eta} - (\bar{J}^0 \bar{U}^j)_{\eta} \\
&\quad - \int_{\partial \Omega} \lambda_s |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \left(\sum_{m=1}^n U^m \nu_{E,m} \right) \nu_{E,j} \vec{v}_E \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket \\
&= (\bar{P}^j \bar{\Theta})_{\eta} - (\bar{G}^j T \bar{\rho})_{\eta} - (\bar{J}^0 \bar{U}^j)_{\eta} \\
&\quad - \sum_{m=1}^n \underbrace{\int_{\partial \Omega} \lambda_s |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| U^m \nu_{E,m} \nu_{E,j} \vec{v}_E \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket}_{(\bar{J}^{jm} \bar{U}^m)_{\eta}} .
\end{aligned} \tag{B.26}$$

Für jede Kombination von Impulskomponenten j und m existiert eine eigene Randsprungmatrix \bar{J}^{jm} . Für feste Vertikalrichtung in z sind diese fast alle gleich null, jedoch nicht für allgemeine Orientierung.

Übersicht der Auswertungsmatrizen

Diese Matrizen können in der Auswertung von L^{ρ} , L^{Θ} und L^{U^j} erkannt werden:

- **Advektionsmatrix** für die vertikale Wirkung der Impulse U^i auf ρ und Θ ,

$$\begin{aligned}
(\bar{D}^j(\omega) \bar{U}^j)_{\eta} &= \int_{\Omega} \omega U^j k_j \vec{k} \cdot \nabla \varphi_{\eta}^M - \int_{\Gamma^0} \omega \{ U^j \} k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket \\
&\quad - \int_{\partial \Omega} \omega U^j (k_j - \nu_{E,j} (\vec{v}_E \cdot \vec{k})) \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_{\eta}^M \rrbracket ,
\end{aligned} \tag{B.27}$$

- **Innere Sprungmatrix**, als Ausnahme gültig für alle Systemvariablen q^ϑ ,

$$\left(\overline{J}^0 \overline{q}^\vartheta\right)_\eta = \int_{\Gamma^0} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket q^\vartheta \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket, \quad (\text{B.28})$$

- **Druckkraftmatrix** für die Wirkung von Θ auf die Impulse U^j ,

$$\begin{aligned} \left(\overline{P}^j \overline{\Theta}\right)_\eta &= \int_{\Omega} p_\theta \Theta k_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_\eta^M - \int_{\Gamma^0} p_\theta \{\Theta\} k_j \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_j \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} p_\theta \Theta k_j \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_j, \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

- **Gravitationsmatrix** für die Wirkung der Erdanziehungskraft auf die Impulse U^j inklusive Glättung \overline{T} ,

$$\left(\overline{G}^j \overline{T} \overline{\rho}\right)_\eta = \int_{\Omega} \varphi_\eta^M \overline{T} \overline{\rho} g k_j \quad (\text{B.30})$$

und

- **Randsprungmatrix** für die Reflexion der Impulse (welche aber auch in der Advektionsmatrix präsent ist),

$$\left(\overline{J}^{jm} \overline{U}^m\right)_\eta = \int_{\partial\Omega} \lambda_s |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| U^m \nu_{E,m} \nu_{E,j} \vec{v}_E \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket. \quad (\text{B.31})$$

Mit den gegebenen Eigenschaften der lokalisierten Basisfunktionen und Gl. 3.8 ist Auswertung der Randmittelwerte durch

$$\{\vartheta\} = \frac{1}{2} \sum_{\eta} \vartheta_\eta \varphi_\eta \quad (\text{B.32})$$

gegeben, die der Sprünge durch

$$\begin{aligned} \llbracket \vartheta \rrbracket &= \left(\sum_{\eta} \vartheta_\eta \varphi_\eta|_1 - \sum_{\eta} \vartheta_\eta \varphi_\eta|_2 \right) \otimes \vec{v}_E = \sum_{\eta} \vartheta_\eta (\varphi_\eta|_1 - \varphi_\eta|_2) \otimes \vec{v}_E \\ &= \sum_{\eta} \vartheta_\eta \llbracket \varphi_\eta \rrbracket. \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Die konkrete Isolierung eines Matrixeintrages sei am Beispiel von $\overline{D}^j(\omega)$ gezeigt:

$$\begin{aligned} \left(\overline{D}^j(\omega) \overline{U}^j\right)_\eta &= \sum_{\zeta} \left(\overline{D}^j(\omega)\right)_{\eta\zeta} U_\zeta^j \\ &= \int_{\Omega} \omega \left(\sum_{\zeta} U_\zeta^j \varphi_\zeta \right) k_j \vec{k} \cdot \overline{\nabla} \varphi_\eta^M \\ &\quad - \int_{\Gamma^0} \omega \frac{1}{2} \left(\sum_{\zeta} U_\zeta^j \varphi_\zeta \right) k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \omega \left(\sum_{\zeta} U_\zeta^j \varphi_\zeta \right) (k_j - \nu_{E,j} (\vec{v}_E \cdot \vec{k})) \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

und schließlich

$$\begin{aligned} \left(\underline{\overline{D}}^j(\omega) \underline{\overline{U}}^j \right)_\eta = \sum_\zeta U_\zeta^j \left(\int_\Omega \omega \varphi_\zeta k_j \vec{k} \cdot \underline{\nabla} \varphi_\eta^M - \frac{1}{2} \int_{\Gamma^0} \omega \varphi_\zeta k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right. \\ \left. - \int_{\partial\Omega} \omega \varphi_\zeta (k_j - \nu_{E,j} (\vec{v}_E \cdot \vec{k})) \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \right). \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Die volle Besetzung der Matrizen folgt entsprechend,

$$\begin{aligned} \left(\underline{\overline{D}}^j(\omega) \right)_{\eta\zeta} &= \int_\Omega \omega \varphi_\zeta k_j \vec{k} \cdot \underline{\nabla} \varphi_\eta^M - \frac{1}{2} \int_{\Gamma^0} \omega \varphi_\zeta k_j \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \omega \varphi_\zeta (k_j - \nu_{E,j} (\vec{v}_E \cdot \vec{k})) \vec{k} \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \\ &= \int_\Omega \omega k_j (\vec{k} \cdot \underline{\nabla} \varphi_\eta^M) \varphi_\zeta + \frac{1}{2} \int_{\Gamma^0} S_E \omega k_j (\vec{k} \cdot \vec{v}_E) \varphi_\eta^M \varphi_\zeta \\ &\quad + \int_{\partial\Omega} S_E \omega (k_j - \nu_{E,j} (\vec{k} \cdot \vec{v})) (\vec{k} \cdot \vec{v}) \varphi_\eta^M \varphi_\zeta \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

$$\left(\underline{\overline{J}}^0 \right)_{\eta\zeta} = \int_{\Gamma^0} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \llbracket \varphi_\zeta \rrbracket \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket \quad (\text{B.37})$$

$$= s(\eta, \zeta) \int_{\Gamma^0} \frac{\lambda_s}{2} |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \varphi_\eta^M \varphi_\zeta \quad (\text{B.38})$$

$$\begin{aligned} \left(\underline{\overline{P}}^j \right)_{\eta\zeta} &= \int_\Omega p_\theta k_j \varphi_\zeta \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_\eta^M - \frac{1}{2} \int_{\Gamma^0} p_\theta \varphi_\zeta k_j \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_j \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} p_\theta \varphi_\zeta k_j \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket_j \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

$$= \int_\Omega p_\theta k_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_\eta^M \right) \varphi_\zeta \quad (\text{B.40})$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{\Gamma^0} S_E p_\theta k_j \nu_{E,j} \varphi_\eta^M \varphi_\zeta + \int_{\partial\Omega} S_E p_\theta k_j \nu_{E,j} \varphi_\eta^M \varphi_\zeta$$

$$\left(\underline{\overline{G}}^j \right)_{\eta\zeta} = \int_\Omega \varphi_\eta^M \varphi_\zeta g k_j \Rightarrow \underline{\overline{G}}^j \underline{\overline{T}} = \dots \quad (\text{B.41})$$

$$\begin{aligned} \left(\underline{\overline{J}}^{jm} \right)_{\eta\zeta} &= \int_{\partial\Omega} \lambda_s |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \varphi_\zeta \nu_{E,m} \nu_{E,j} \underbrace{\vec{v}_E \cdot \llbracket \varphi_\eta^M \rrbracket}_{= \varphi_\eta^M} \\ &= \int_{\partial\Omega} \lambda_s |\vec{v}_E \cdot \vec{k}| \nu_{E,j} \nu_{E,m} \varphi_\eta^M \varphi_\zeta. \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

Noch weiter im Detail bezieht sich die Berechnung schließlich auf einzelne Elemente bzw. deren Grenzflächen. Ein Volumenintegral für Basen φ_η und φ_ζ wird dabei zum Integral über jedes Basenpaar jeweils innerhalb eines Elementes — alle anderen Basen tragen hier nichts bei. Überall implizit ist die Umrechnung zwischen dem 1-basierten Basisindex i im Element j zum globalen η bzw. ζ , mit der Anzahl K der Basen pro Element:

$$\eta(i, j) = (j - 1)K + i. \quad (\text{B.43})$$

Das Symbol $s(\eta, \zeta)$ gibt an, ob die Basen φ_η und φ_ζ ihren Träger auf dem gleichen Element haben. Gehören beide Basen zum selben Element, ist $s(\eta, \zeta) = 1$, andernfalls $s(\eta, \zeta) = -1$. Damit wird die unterschiedliche Orientierung der Sprünge abgebildet. Ein weiteres Detail der Berechnung, ein Aspekt der Festlegung der Orientierung von Normalenvektoren, ist das Symbol S_E , welches sich auf das Element bezieht, als dessen Rand die Grenzfläche gerechnet wird. Es gilt $S_E = -1$ für das als „innen“ definierte Element und $S_E = 1$ für das als „außen“ definierte, getreu der Festlegung des nach außen orientierten Normalenvektors \vec{v}_E .

Zusammengefasst ist die linearisierte Zeitableitung der Koeffizienten nun aufgestellt,

$$\begin{aligned}\underline{\bar{L}}^\rho \bar{q} &= \sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j(1) \bar{U}^j - \underline{\bar{J}}^0 \bar{\rho} \\ \underline{\bar{L}}^\Theta \bar{q} &= \sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \bar{U}^j - \underline{\bar{J}}^0 \bar{\rho} \\ \underline{\bar{L}}^{U^j} \bar{q} &= \underline{\bar{P}}^j \bar{\Theta} - \underline{\bar{G}}^j T \bar{\rho} - \underline{\bar{J}}^0 \bar{U}^j - \sum_{m=1}^n \underline{\bar{J}}^{jm} \bar{U}^m\end{aligned}\quad (\text{B.44})$$

B.1.3. Das implizite Gleichungssystem und dessen Lösung

Das im semi-impliziten Verfahren zu lösende lineare Gleichungssystem Gl. 3.47 ist mit den syntaktischen Vereinfachungen $c_t = \kappa \Delta t \xi_{-1}$ und $q = q^{\text{tt}}$ sowie $q_r = q^{\text{ths}}$ für die Variablen q^θ

$$\bar{q}^\theta - c_t \underline{\bar{L}}^\theta \bar{q} = \bar{q}_r^\theta, \quad (\text{B.45})$$

nach Einsetzen von Gl. B.44

$$\begin{aligned}\bar{\rho} - c_t \left(\sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j(1) \bar{U}^j - \underline{\bar{J}}^0 \bar{\rho} \right) &= \bar{\rho}_r \\ \bar{\Theta} - c_t \left(\sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \bar{U}^j - \underline{\bar{J}}^0 \bar{\rho} \right) &= \bar{\Theta}_r \\ \bar{U}^j - c_t \left(\underline{\bar{P}}^j \bar{\Theta} - \underline{\bar{G}}^j T \bar{\rho} - \underline{\bar{J}}^0 \bar{U}^j - \sum_{m=1}^n \underline{\bar{J}}^{jm} \bar{U}^m \right) &= \bar{U}_r^j.\end{aligned}\quad (\text{B.46})$$

Mit der Definition

$$\bar{\underline{A}} = \bar{\underline{\text{Id}}} + c_t \underline{\bar{J}}^0 \quad (\text{B.47})$$

ist die Umstellung der ersten beiden Gleichungen aus Gl. B.46 nach nach $\bar{\rho}$ bzw $\bar{\Theta}$ offenbar,

$$\begin{aligned}\bar{\underline{A}} \bar{\rho} &= \bar{\rho}_r + c_t \sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j(1) \bar{U}^j \\ \bar{\underline{A}} \bar{\Theta} &= \bar{\Theta}_r + c_t \sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \bar{U}^j\end{aligned}\quad (\text{B.48})$$

Für die Lösbarkeit des Systems ist es wichtig, dass die Matrizen $\bar{\underline{A}}$ mit der Identität als wesentlichem Bestandteil als invertierbar angenommen werden können. Die $\underline{\bar{D}}^j$ können prinzipiell alle singular sein.

Mit Gl. B.48 und diesen Umstellungen kann nun das Impulgleichungssystem in voller Bestimmtheit formuliert werden:

$$\bar{U}_r^j = \bar{U}^j - c_t \left(\bar{P}^j \bar{\Theta} - \bar{G}^j \bar{T} \bar{\rho} - \bar{J}^0 \bar{U}^j - \sum_{m=1}^n \bar{J}^{jm} \bar{U}^i \right) \quad (\text{B.49})$$

$$= \bar{A} \bar{U}^j \quad (\text{B.50})$$

$$- c_t \bar{P}^j \bar{A}^{-1} \left(\bar{\Theta}_r + c_t \sum_{i=1}^n \bar{D}^i \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \bar{U}^i \right) \quad (\text{B.51})$$

$$+ c_t \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} \left(\bar{\rho}_r + c_t \sum_{i=1}^n \bar{D}^i(1) \bar{U}^i \right) \quad (\text{B.52})$$

$$+ c_t \sum_{i=1}^n \bar{J}^{ji} \bar{U}^i . \quad (\text{B.53})$$

Separation der Terme mit Impulsvariablen und der mit rechten Seiten ergibt

$$\begin{aligned} & \bar{A} \bar{U}^j - c_t \bar{P}^j \bar{A}^{-1} c_t \sum_{i=1}^n \bar{D}^i \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \bar{U}^i \\ & + c_t \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} c_t \sum_{i=1}^n \bar{D}^i(1) \bar{U}^i + c_t \sum_{i=1}^n \bar{J}^{ji} \bar{U}^i \\ & = \bar{U}_r^j - c_t \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} \bar{\rho}_r + c_t \bar{P}^j \bar{A}^{-1} \bar{\Theta}_r \end{aligned} \quad (\text{B.54})$$

$$\Leftrightarrow \bar{A} \bar{U}^j + \underbrace{\sum_{i=1}^n \left(-c_t \bar{P}^j \bar{A}^{-1} c_t \bar{D}^i \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) + c_t \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} c_t \bar{D}^i(1) + c_t \bar{J}^{ji} \right) \bar{U}^i}_{\bar{B}^{ji}} \quad (\text{B.55})$$

$$= \bar{U}_r^j - c_t \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} \bar{\rho}_r + c_t \bar{P}^j \bar{A}^{-1} \bar{\Theta}_r .$$

Die Impulgleichungen können für den Vektor aller Impulskoeffizienten zusammengefasst werden. So ist eine äquivalente, kompakte Form

$$(\bar{A}^* + \bar{B}^*) \bar{U}^* = \bar{U}_r^* + \bar{E}^* \bar{\rho}_r + \bar{F}^* \bar{\Theta}_r \quad (\text{B.56})$$

mit den Definitionen

$$\begin{aligned} \bar{U}^* &= \begin{pmatrix} \bar{U}^1 \\ \vdots \\ \bar{U}^n \end{pmatrix}; \bar{U}_r^* = \begin{pmatrix} \bar{U}_r^1 \\ \vdots \\ \bar{U}_r^n \end{pmatrix} \\ \bar{A} &= \bar{\text{Id}} + c_t \bar{J}^0 \Rightarrow \bar{A}^* = \begin{pmatrix} \bar{A} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \bar{A} \end{pmatrix} \\ \bar{B}^{ji} &= c_t \left(-\bar{P}^j \bar{A}^{-1} c_t \bar{D}^i \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) + \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} c_t \bar{D}^i(1) + \bar{J}^{ji} \right) \\ \bar{E}^j &= -c_t \bar{G}^j \bar{T} \bar{A}^{-1} \\ \bar{F}^j &= c_t \bar{P}^j \bar{A}^{-1} \\ \bar{B}^* &= \begin{pmatrix} \bar{B}^{11} & \dots & \bar{B}^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{B}^{n1} & \dots & \bar{B}^{nn} \end{pmatrix}; \bar{E}^* = \begin{pmatrix} \bar{E}^1 \\ \vdots \\ \bar{E}^n \end{pmatrix}; \bar{F}^* = \begin{pmatrix} \bar{F}^1 \\ \vdots \\ \bar{F}^n \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{B.57})$$

Die einzelne Matrix $\underline{\bar{A}}$ bildet das Grundgerüst der Gesamtmatrix $(\underline{\bar{A}} + \underline{\bar{B}})$, die Diagonale, welche für die Invertierbarkeit verantwortlich ist. Je nach Vertikalrichtung bzw. Reflexionswinkel kommen dazu die Einträge der Gesamtmatrix $\underline{\bar{B}}$, welche im Allgemeinen sehr dünn besetzt und auch schlecht konditioniert sein kann.

Die rechte Seite von Gl. B.56 ist gegeben, insbesondere durch Auswertung der Produkte der $(K \times Kn)$ -Matrizen E^* und F^* mit den einfachen Vektoren \vec{q}^θ der Länge K ,

$$\underline{\bar{E}}^* \vec{\rho}_r = \begin{pmatrix} \underline{\bar{E}}^1 \vec{\rho}_r \\ \vdots \\ \underline{\bar{E}}^n \vec{\rho}_r \end{pmatrix}. \quad (\text{B.58})$$

Zur Lösung kann $(\underline{\bar{A}} + \underline{\bar{B}})$ direkt numerisch invertiert und in der Umsetzung anfangs gespeichert werden, so dass die Auflösung des Systems Gl. B.46 durch

$$\vec{U}^* = (\underline{\bar{A}} + \underline{\bar{B}})^{-1} (\vec{U}_r + \underline{\bar{E}}^* \vec{\rho}_r + \underline{\bar{F}}^* \vec{\Theta}_r) \quad (\text{B.59})$$

$$\Rightarrow \vec{\rho} = \underline{\bar{A}}^{-1} \left(\vec{\rho}_r + c_t \sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j(1) \vec{U}^j \right) \quad (\text{B.60})$$

$$\vec{\Theta} = \underline{\bar{A}}^{-1} \left(\vec{\Theta}_r + c_t \sum_{j=1}^n \underline{\bar{D}}^j \left(\frac{\Theta_0}{\rho_0} \right) \vec{U}^j \right) \quad (\text{B.61})$$

erfolgt.

B.2. Zustände im hydrostatischen Gleichgewicht

Zur Vollständigkeit sind in diesem Abschnitt kurze Herleitungen der in dieser Arbeit verwendeten hydrostatischen Atmosphärenzustände enthalten. Gemeinsam ist die Voraussetzung der idealen Gasgleichung Gl. 2.13 und einer konstanten Erdbeschleunigung g .

Im rein hydrostatischen Zustand darf der Druck nur mit der Höhe z variieren, wodurch man das totale Differential der Funktion $p(z)$ in Form der hydrostatischen Grundgleichung ansetzen kann:

$$\frac{dp}{dz} = -\rho g. \quad (\text{B.62})$$

Tatsächlich gilt die Bedingung der alleinigen Abhängigkeit von z , also des Verschwindens des horizontalen Gradienten, nur für den Druck. Ohne Zusätze wie Wärmeleitung im Medium bzw. allgemeine Diffusion dürfen Dichte und Temperatur prinzipiell horizontale Gradienten aufweisen, sofern diese den Druck konstant halten. Grundsätzlich soll hier aber davon kein Gebrauch gemacht und die Zustände horizontal konstant definiert werden. Es geht somit um die Festlegung der Zustandsgrößen in einer Säule für alle z , die in Erweiterung für das gesamte Modellgebiet gilt.

Nach gängiger Praxis sind die verschiedenen Zustände primär durch einen postulierten vertikalen Temperaturverlauf definiert. Daraus folgen die isotherme, die polytrope und als weiterer Spezialfall die isentrope Atmosphäre. Eine mehrschichtige mit stückweise linearem Temperaturverlauf und die uniform geschichtete Atmosphäre bilden den Abschluss.

B.2.1. Isotherm

Die einfachste Vorgabe ist die einer vertikal konstanten Temperatur zur isothermen Atmosphäre,

$$T(z) = T_r \Rightarrow \rho(z) = \frac{p}{RT_r}. \quad (\text{B.63})$$

Der Druckgradient Gl. B.62 ist damit schnell durch Variablenseparation in der Vertikalen integriert,

$$dp = -\frac{p}{RT_r} g dz \stackrel{p \neq 0}{\Rightarrow} \int_{p_r}^p \frac{1}{p} dp = -\frac{g}{RT_r} \int_0^z dz \Rightarrow p(z) = p_r e^{-\frac{g}{RT_r} z}. \quad (\text{B.64})$$

Die barometrische Höhenformel Gl. B.64 liefert zur definierten Temperatur den Druck, womit der thermodynamische Zustand vollständig bestimmt ist.

B.2.2. Polytrop

Der nächste Schritt ist die Zulassung von linearer Variation der Temperatur mit der Höhe,

$$T(z) = T_r - \alpha z. \quad (\text{B.65})$$

Entsprechend dem allgemein mit der Höhe fallenden Temperaturverlauf in der Troposphäre ist der Anstieg $-\alpha$ negativ definiert. Damit gestaltet sich die Integration nur etwas aufwändiger. Eine Substitution von $T(z)$ kommt hinzu. Der Druck ergibt sich über

$$\frac{1}{p} dp = -\frac{g}{RT(z)} dz \Leftrightarrow \int_{p_r}^{p(z)} \frac{1}{p'} dp' = -\frac{g}{R} \int_0^z \frac{1}{T(z')} dz' = \frac{g}{\alpha R} \int_{T_r}^{T(z)} \frac{1}{T'} dT'$$

zu

$$p(z) = p_r \left(\frac{T(z)}{T_r} \right)^{\frac{g}{\alpha R}}. \quad (\text{B.66})$$

Dieser Zustand wird polytrop genannt, weil die vertikale Struktur durch polytrope Zustandsänderungen erreicht werden kann. Deren Kennzeichen ist $pV^{n_p} = \text{const}$ bzw. $p/\rho^{n_p} = \text{const}$, der Exponent n_p bestimmt durch den Zusammenhang

$$\frac{p}{\rho^{n_p}} = \frac{R^{n_p} T^{n_p}}{p^{n_p-1}} = \frac{R^{n_p} T_r^{\frac{g}{\alpha R} (n_p-1)}}{p_r^{n_p-1}} \frac{T^{n_p}}{T_r^{\frac{g}{\alpha R} (n_p-1)}} = \text{const} \quad (\text{B.67})$$

$$\Rightarrow n_p = \frac{g}{\alpha R} (n_p - 1) \Leftrightarrow n_p = \frac{1}{1 - \frac{\alpha R}{g}}. \quad (\text{B.68})$$

B.2.3. Isentrop

Während die isotherme Atmosphäre die absolute Temperatur vertikal konstant hält, bringt ein bestimmter Wert für die Temperaturänderungsrate,

$$\alpha = \frac{g}{c_p}, \quad (\text{B.69})$$

die Konstanz der potentiellen Temperatur, wie aus der Kombination von Gl. 2.23 mit Gl. B.66 zu ersehen ist:

$$\theta(z) = T(z) \left(\frac{p_r}{p(z)} \right)^{\frac{R}{c_p}} = T(z) \left(\frac{1}{\left(\frac{T(z)}{T_r} \right)^{\frac{g}{\alpha R}}} \right)^{\frac{R}{c_p}} = T(z) \left(\left(\frac{T_r}{T(z)} \right)^{\frac{c_p}{R}} \right)^{\frac{R}{c_p}} = T_r . \quad (\text{B.70})$$

Der Exponent n_p wird hier zum Isentropenexponenten

$$n_p = \frac{1}{1 - \frac{gR}{c_p g}} = \frac{c_p}{c_p - R} = \frac{c_p}{c_v} = \gamma . \quad (\text{B.71})$$

B.2.4. Mehrfach polytrop

Eine weitere Näherung an reale atmosphärische Verhältnisse stellt eine Kombination von mehreren Schichten mit jeweils linearem Temperaturverlauf dar, um beispielsweise die Normatmosphäre nach COESA (1976) nachzubilden. Die mehrfach polytrophe Atmosphäre spaltet das Druckintegral auf in N_L Stufen für N_L Schichten vom Boden, mit $z_{N_L} = z$ als Endpunkt der Rechnung für eine Auswertung bei z . Die Stufen bestehen in einer Abfolge von polytropen ($\alpha \neq 0$) bzw. isothermen ($\alpha = 0$) Schichten, die wie bereits betrachtet berechnet werden. Hier ist mit dem Index i der Wert ab der Oberkante der betreffenden Schicht bezeichnet, mit $i = 0$ der Bodenwert. Die Schicht N_L ist definiert als die finale Schicht, die den gewünschten Wert von z enthält.

Mit den Festlegungen

$$\begin{aligned} z_0 &= 0; \quad z_{N_L} = z \\ T_i &= T_B - \sum_{m=1}^i \alpha_m (z_m - z_{m-1}) \\ \partial_z T(z') &= -\alpha_i \quad \forall z' : z_{i-1} \leq z' \leq z_i \\ p_i &= \alpha_i \neq 0 \left\{ \begin{array}{l} ? \\ \frac{T_i}{T_{i-1}} \\ \vdots \\ e^{-\frac{g}{RT_{i-1}}(z_i - z_{i-1})} \end{array} \right. \\ c_i &= \alpha_i \neq 0 \left\{ \begin{array}{l} ? \\ \frac{g}{\alpha_i R} \\ \vdots \\ 1 \end{array} \right. \end{aligned} \quad (\text{B.72})$$

ist der atmosphärische Zustand durch

$$T(z) = T_{N_L} ; \quad p(z) = p_B \prod_{i=1}^{N_L} (p_i)^{c_i} \quad (\text{B.73})$$

gegeben.

B.2.5. Uniform geschichtet

Die uniform geschichtete Atmosphäre ist definiert durch eine stabile Schichtung mit vertikal konstanter reeller Brunt-Vaisala-Frequenz

$$N_{\text{brunt}} = \sqrt{g \partial_z \ln \theta} = \sqrt{\frac{g}{\theta} \partial_z \theta} , \quad (\text{B.74})$$

deren Definition auch in Holton (2004, Gl. 2.52) oder Etling (2008, Gl. 6.34) zu finden ist. Die erste Form offenbart direkt, dass der Logarithmus der potentiellen Temperatur bei konstanter Frequenz eine Konstante ist und somit zusammen mit der statischen Stabilität

$$\sigma = \frac{N_{\text{brunt}}^2}{g} = \frac{\partial_z \theta}{\theta} = \partial_z \ln \theta = \text{const} \quad (\text{B.75})$$

als anderem Ausdruck der Brunt-Vaisala-Frequenz der exponentielle Verlauf der potentiellen Temperatur

$$\theta = T_r e^{\sigma z} \quad (\text{B.76})$$

gegeben ist. Zusammen mit der Definition Gl. 2.23 kann daraus die Temperatur

$$T(p, z) = \theta(z) \left(\frac{p}{p_r} \right)^{\frac{R}{c_p}} \quad (\text{B.77})$$

als Funktion von Druck und z formuliert werden. Den Druck als Funktion von z erhält man aus der Hydrostatik nach Verwendung der obigen Form der Temperatur. Das Resultat der Integration nach Separation der Terme in p und z , wie zuvor mehrfach ausgeführt, ist

$$\left(\frac{p}{p_r} \right)^{\frac{R}{c_p}} = \frac{T}{\theta} = 1 + \frac{g}{c_p T_r \sigma} (e^{-\sigma z} - 1) \quad (\text{B.78})$$

und somit sind Druck und Temperatur nach

$$p = p_r \left(\frac{T}{\theta} \right)^{\frac{c_p}{R}}, \quad T = \left(\frac{T}{\theta} \right) \theta \quad (\text{B.79})$$

bestimmt.

B.3. Barokliner Zustand im p -System

Wie von Jablonowski und Williamson (2006) oder auch Polvani et al. (2004) dargestellt, ist im p -System die analytische Aufstellung von geostrophisch balancierten Grundströmen mit vorgegebenem Wind möglich. Wenn der Wind als $u(y, p)$ gegeben ist, kann man $T(y, p)$ und $\Phi(y, p)$ ausrechnen bzw. zumindest das bestimmende Integral direkt

aufschreiben,

$$\frac{\partial p}{\partial \Phi} = -g \quad (\text{B.80})$$

$$\underbrace{\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \omega \frac{\partial v}{\partial p} + f_c u}_{=0 \Leftrightarrow v=0} = -\frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (\text{B.81})$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -f_c(y)u(y,p) \quad (\text{B.82})$$

$$\Rightarrow \Phi(y,p) = -\int_{y_0}^y f_c(y')u(y',p) dy' + \underbrace{\Phi(y_0,p)}_{\Phi_0(p)} \quad (\text{B.83})$$

$$-\frac{RT}{p} = \frac{\partial \Phi}{\partial p} \quad (\text{B.84})$$

$$\Rightarrow T(y,p) = -\frac{p}{R} \frac{\partial \Phi}{\partial p} \quad (\text{B.85})$$

$$= -\int_{y_0}^y f_c(y') \frac{\partial u}{\partial p}(y',p) dy' + \frac{\partial \Phi_0}{\partial p}(p) \quad (\text{B.86})$$

$$= -\int_{y_0}^y f_c(y') \frac{\partial u}{\partial p}(y',p) dy' + \frac{R}{p} T_0(p) . \quad (\text{B.87})$$

Wenn es aber um Zustände im z -System geht, wird es spätestens bei der Transformation in dieses praktisch zu numerischer Auswertung kommen, wenn Integrale auf dem Zwischenweg nicht schon Quadratur erfordern. Auch dann bleibt aber der Fakt, dass nur $u(y,p)$ frei wählbar ist, nicht aber direkt die Darstellung $u(y,z)$. Der in dieser Arbeit dargestellte Ansatz bietet den direkten Zugriff auf Felder im z -System.

C. Zusätzliche Simulationsdaten

C.1. Stabilitätskarten zu baroklinen Langzeitsimulationen

Die Stabilitätskarten nach Abs. 7.2 für die in Abs. 7.4 genutzte Gitterkonfiguration unterscheiden sich nur im Detail für kurze Wellen bzw. in der Ausprägung der nichtlinearen Strukturen von denen für zehn Elemente in z auf 10 km in Abb. 7.8. Der Vollständigkeit halber sind sie in Abb. C.1 nachgereicht.

C.2. Wirbelentstehung nahe Oberrand

Die in Abs. 7.3 angesprochenen Abbildungen Abb. C.2 und Abb. C.3 zeigen zusätzlich zu den Ansichten bei 1 km Höhe aus Abb. 7.13 und Abb. 7.14 die Entwicklung in 4 km Höhe.

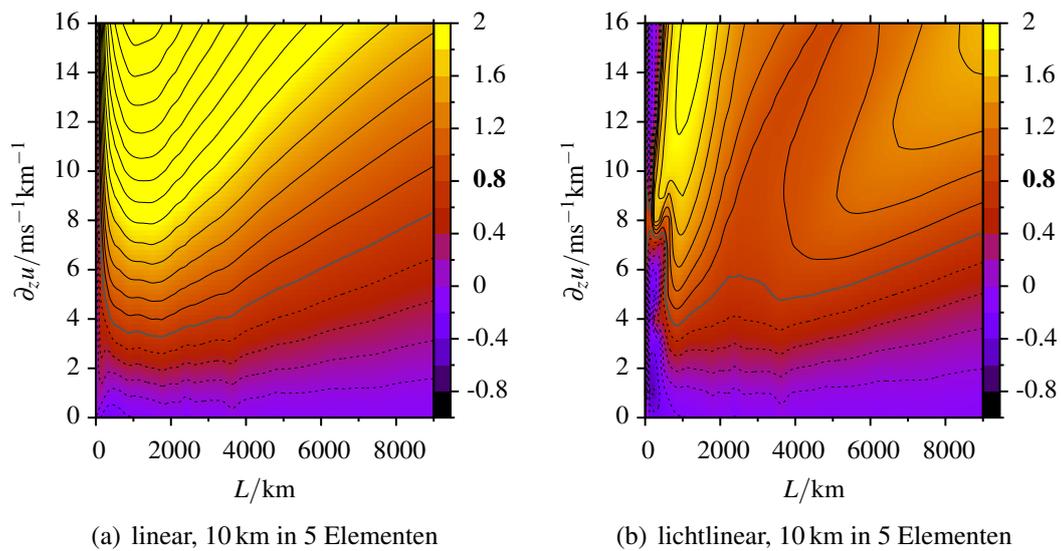


Abbildung C.1.: Parameterkarten der baroklinen Instabilität mit genähertem Exponenten des Störungswachstums, Gitterkonfiguration passend zu Abs. 7.4, mit $\partial_z T = -6.5$ K/km sowie für lineare und nichtlineare Euler-Gleichungen; Kontur für 0.8 grau und etwas dicker, jene darunter gestrichelt

C.3. Zusätzliche Horizontalschnitte des baroklinen Langzeitlaufes

Ergänzend zu den Darstellungen in Abs. 7.4.3, welche die Vorticity von `dzu08b00` bei 5 km zeigen, stellen Abb. C.4 und Abb. C.5 die Entwicklung in zwei bzw. acht Kilometern dar.

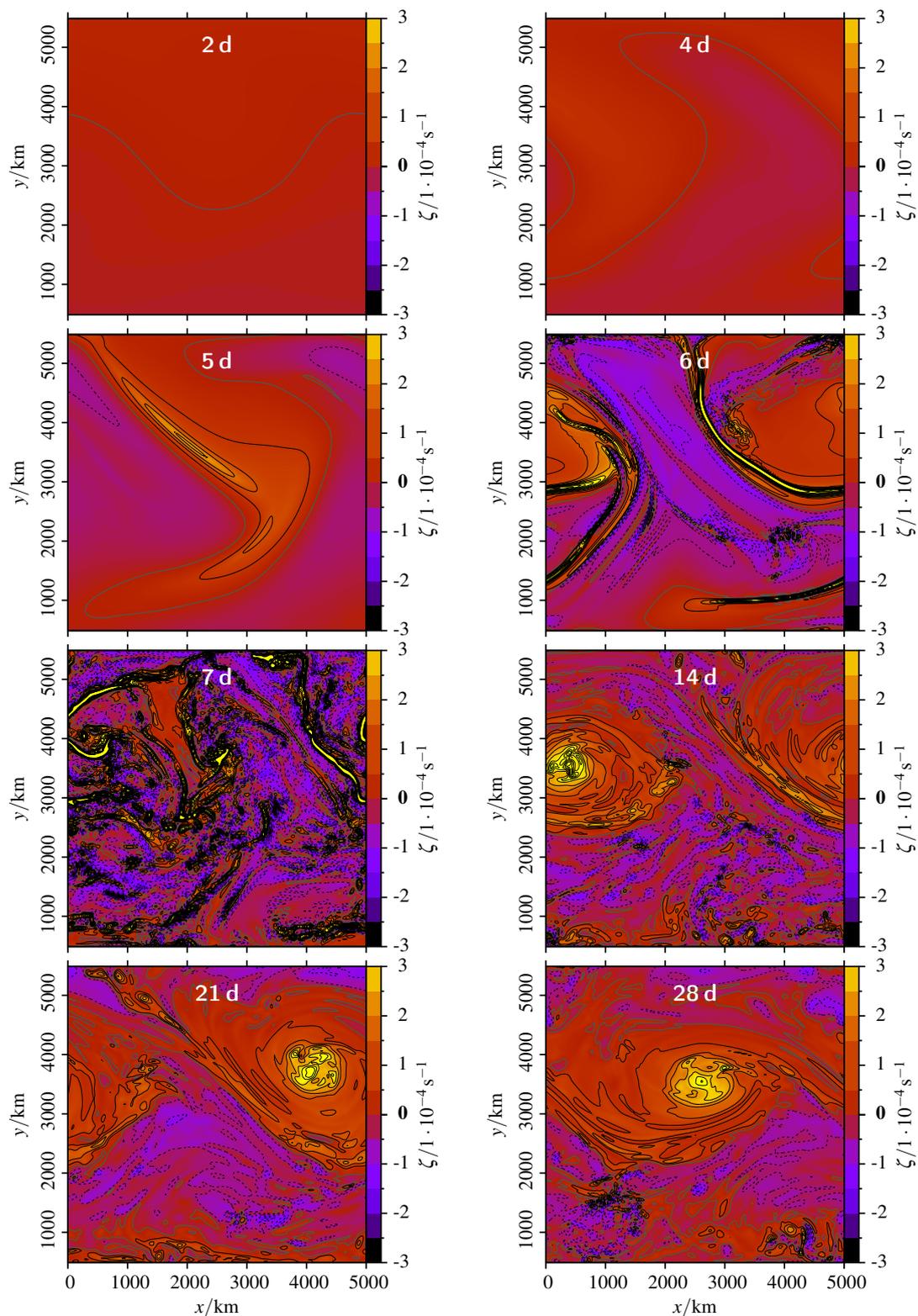


Abbildung C.2.: Wirbelentwicklung aus Wellenpaket in Ansichten von Horizontalschnitten der Vorticity auf $z = 4$ km Höhe nach 2, 4, 5, 6, 7, 14, 21 und 28 Tagen; Konturintervall $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, Zentralkontur bei 0

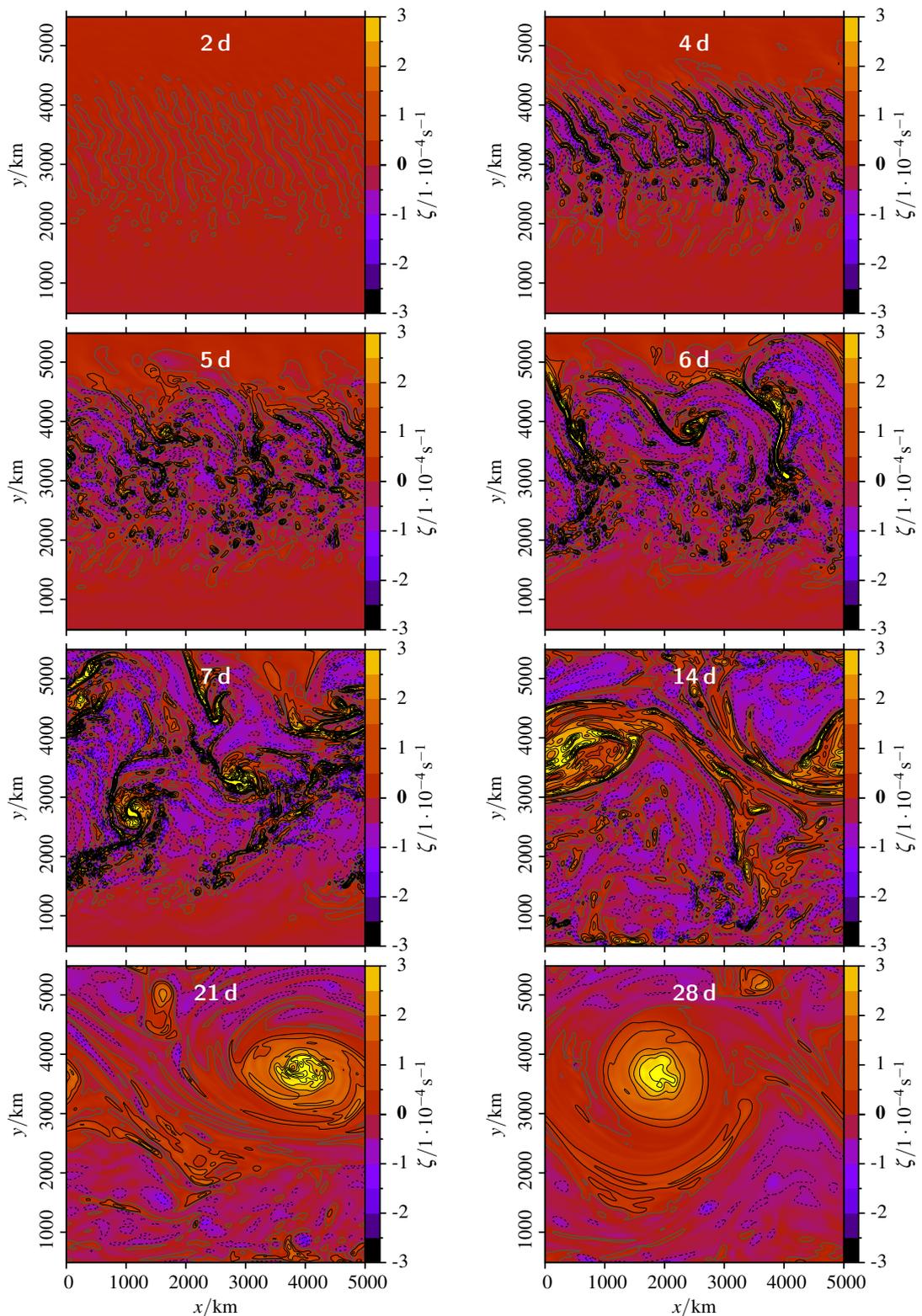


Abbildung C.3.: Wirbelentwicklung aus Rauschen in Ansichten von Horizontalschnitten der Vorticity auf $z = 4$ km Höhe nach 2, 4, 5, 6, 7, 14, 21 und 28 Tagen; Konturintervall $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, Zentralkontur bei 0

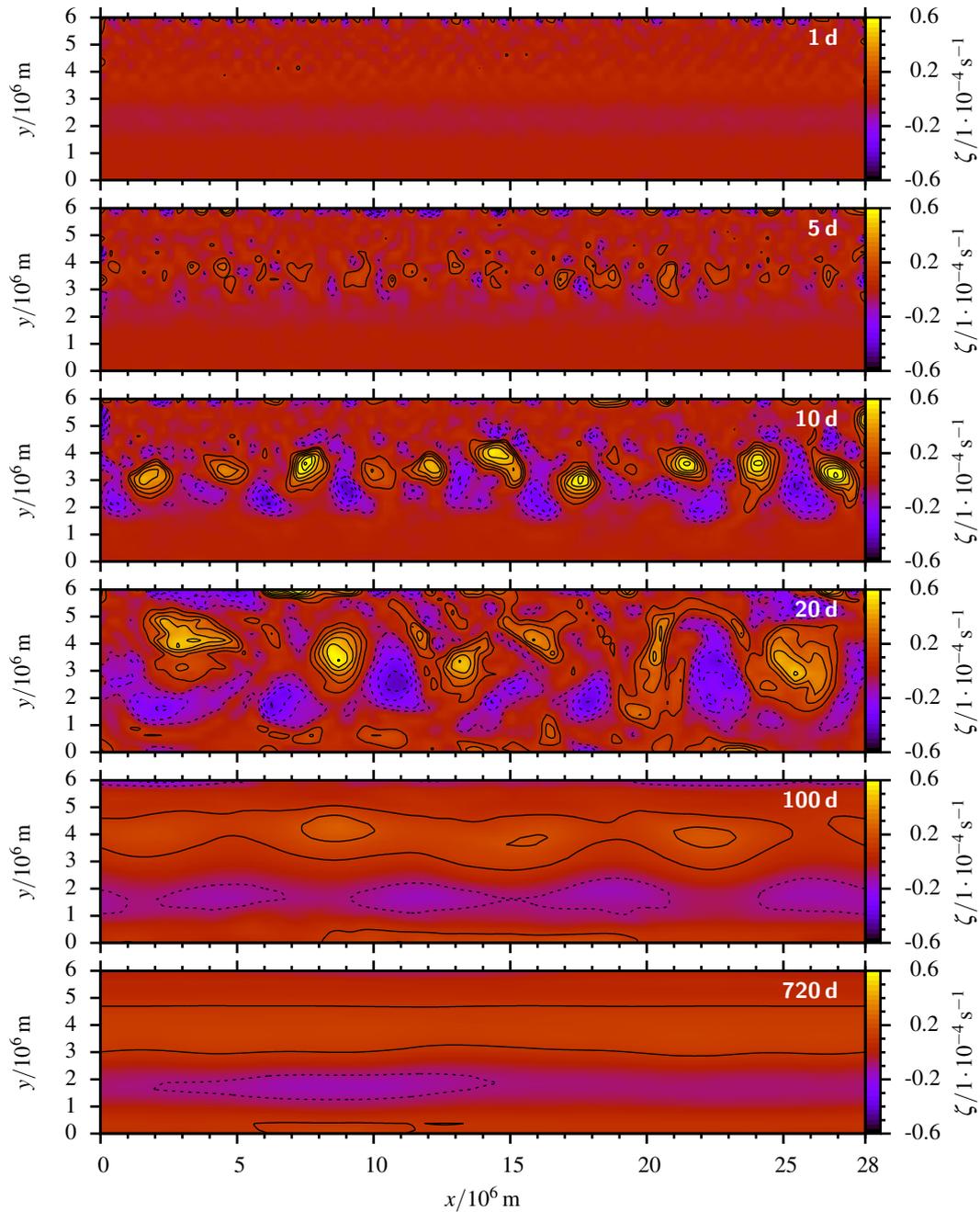


Abbildung C.4.: Ansichten des Laufs mit großem thermischen Wind (dzu08b00), von *oben* nach *unten*: Vorticity nach 1 d, 5 d, 10 d, 20 d, 100 d sowie 720 d; Horizontalschnitt bei 2 km, Konturintervall $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

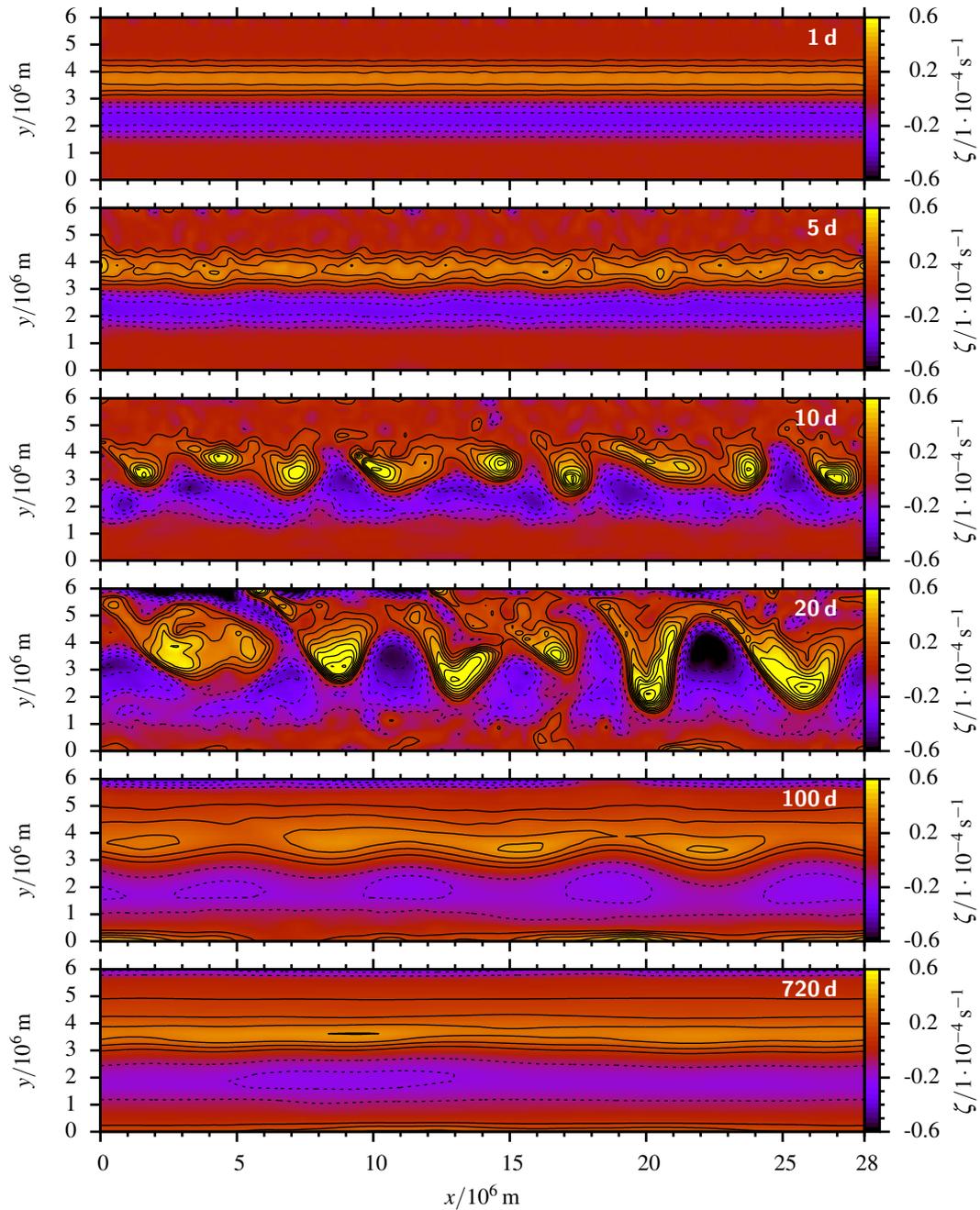


Abbildung C.5.: Ansichten des Laufs mit großem thermischen Wind (dzu08b00), von *oben* nach *unten*: Vorticity nach 1 d, 5 d, 10 d, 20 d, 100 d sowie 720 d; Horizontalschnitt bei 8 km, Konturintervall $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, negative gestrichelt, keine Nulllinie

D. Implementierung: Programmpaket Polyflux

Das in dieser Arbeit beschriebene Verfahren ist im Programmpaket „Polyflux“ umgesetzt, dessen Quellen in digitaler Form beigelegt bzw. vom Autor erhältlich sind. Der Name bezieht sich einerseits auf **polynomiale** Basen und Gleichungen in „**flux**“ form (Flussform), andererseits auf flexible Einstellung einer Modelkonfiguration inkl. des Gleichungssystems (aus vielen = **poly** mit verschiedener Flussfunktion = **flux**).

Es wurde in der Programmiersprache Fortran 95 (ISO, 1997) mit Erweiterung zur Verwendung von Allocatables (ISO, 2001) implementiert, unter Verwendung eines im Quellarchiv enthaltenen Präprozessors. Als Option zur Kompilierzeit ist einfache Parallelisierung auf mehrere Threads mittels OpenMP¹ enthalten.

Als experimentelle Plattform bietet Polyflux die Grundlage für vielfältige Simulationen in verschiedenen Modellkonfigurationen. Dabei kann eine Vielzahl von Modellparametern, von physikalischen Konstanten und der Gitterkonfiguration bis hin zur Auswahl einer Variante des zu lösenden Gleichungssystems und der Manipulation von Details der Numerik, zur Laufzeit eingestellt werden. Auch die in Kap. 5 dargestellten Maßnahmen zur Stabilisierung sind derzeit als Laufzeitoptionen zu- bzw. abschaltbar.

Die in dieser Arbeit behandelten Testfälle und die Simulationen zu verschiedenen Instabilitäten stehen in Form von kombinierbaren Konfigurationsdateien bzw. Shell-Skripten zur Verfügung. Mit der modularen Struktur ist der Ansatz verbunden, Erweiterungen des Verfahrens möglichst einfach zu gestalten. Denkbare Erweiterungen sind

- Wärmeaustausch (Quellterm für Θ),
- Energiesystem (Gl. 2.36),
- effiziente Behandlung des vertikalen Filters (dünne Matrizen),
- unstrukturierte Dreieckgitter bzw. Prismengitter in 3D,
- Kugelgeometrie (Einbettung in 3D mit kartesischen Koordinaten) und
- Parallelisierung mittels MPI.²

Die Umsetzung von Modellkonfigurationen in 1D, 2D oder 3D nutzt eine aus Einsortierung der aktuellen Koordinaten in den dreidimensionalen Raum bestehende Abbildung in beide Richtungen, um z.B. die Definition der Corioliskraft aus 3D in einem horizontalen Modell anzuwenden. Diese Abbildung bestimmt auch bei einem zweidimensionalen Modell, ob es sich um ein horizontales x - y -Modell handelt oder um eine x - z -Modell mit einer horizontalen und einer vertikalen Richtung. So finden Berechnungen außerhalb der eigentlichen numerischen Integration, wie die Auswertung von Anfangszuständen, immer in dreidimensionalen Koordinaten statt, während sich die Modelldynamik in einem echten 1D- oder 2D-Modell entwickeln kann.

Neben dem Simulationsprogramm an sich sind auch einige Analysewerkzeuge zur Arbeit mit den spezifischen NetCDF-Ausgaben³ der DG-Diskretisierung in Polyflux enthalten.

¹ Standard zur Parallelisierung auf Mehrkern-Computern, <http://openmp.org>

² Message Passing Interface, <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>,

³ Network Common Data Form, <http://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/>

E. Korrekturen zur Veröffentlichung

Die veröffentlichte Version der Dissertation hat im Vergleich zur den Gutachtern vorgelegten Version folgende Korrekturen erfahren:

- Bezeichnung von Abb. 7.14, Abb. C.2 und Abb. C.3 im Abbildungsverzeichnis passend zu den bereits korrekten Bildbeschreibungen,
- Entfernung eines überzähligen Wortes („um“) aus Abs. 2.3, letzter Absatz,
- Rechtschreibkorrektur von „instabilen“ in Kap. 8, Absatz 4,
- Austausch einer fälschlichen Referenz auf Gl. 2.23 durch eine auf Gl. 2.17 in Abs. 2.4.5, erster Absatz,
- Rechtschreibkorrektur von „Umsetzung“ und Entfernung von „beschränkt“ im vorletzten Absatz von Abs. 5.1.4,
- Präzisierung des Einschubs zu linearen Quelltermen in Bezug auf Corioliskraft im ersten Absatz von Abs. 5.1.2,
- Klarstellung zu einem Detail der Quelltermbehandlung durch hinzugefügten neuen dritten Absatz in Abs. 5.1.3 („Mit der Einführung der Auswertung des Flusses ...“),
- Ersetzen von „Projektion“ durch „Transformation“ in Abs. 5.1.3, Absatz 5 (vormals 4) sowie
- Überarbeitung des 6. und 7. Absatzes von Abs. 5.1.4 mit
 - Klarstellung der Anwendung der Abbildung auf die Quellterme, nicht die eingehenden Variablen,
 - Beschreibung passend zu der für die Simulationsrechnungen genutzten Programmkonfiguration und
 - Vermeidung des unpräzisen Gebrauchs des Begriffs der mathematischen Projektion.

Mathematische Definitionen

$\vec{\cdot}$ Auszeichnung eines Vektor, insbesondere auch \vec{f}_i einen Vektor mit Index i und nicht eine Vektorkomponente bezeichnend; 4

$\bar{\cdot}$ Auszeichnung eines Koeffizientenvektors bezüglich einer Basisdarstellung, insbesondere auch \bar{q}_i einen Koeffizientenvektor zu indizierter Variable q_i und nicht eine Vektorkomponente bezeichnend; 4

$\underline{\cdot}$ Auszeichnung einer Matrix, z.B. \underline{f} ; 4

β Ableitung des linearisierten Coriolisparameters f_c nach y ; 2–4, 8, 41, 42, 87, 88, 94, 95, 103, 117, 150

\bar{B} Matrix der Dualbasis der Koordinatentransformation $\vec{\gamma}_E$; 20, 21

χ eindimensionale lokale Koordinate in einem Referenzelement D ; 20, 21, 23, 24

$\vec{\chi}$ lokaler Koordinatenvektor in einem Referenzelement D ; 20, 22, 24, 25, 149, 151

c_p Wärmekapazität bei konstantem Druck, für trockene Luft allgemein angenommen als $c_p \approx 1011 \text{ J/kg K}$ (berechnet aus Vorgabe von R und κ); 7, 8, 13, 140, 153

c_s maximale Wellengeschwindigkeit (bei Euler-Gleichungen Schallgeschwindigkeit in Luft); 13, 17, 18

c_v Wärmekapazität bei konstantem Volumen, für trockene Luft allgemein angenommen als $c_v \approx 724 \text{ J/kg K}$ (berechnet aus Vorgabe von R und κ); 13, 153

D mathematisches Referenzelement zu Realelement E in Koordinaten $\vec{\chi}$; 19–24, 64, 151

∂_t partielle Ableitung nach t ,

$$\partial_t q = \frac{\partial q}{\partial t},$$

(entsprechend auch nach x oder anderen Größen); 5, 6, 8, 9, 11–15, 18, 19, 25, 35, 38–45, 47–50, 54, 55, 62, 63, 77, 87–93, 95, 96, 103, 104, 108–111, 125–127, 139, 140, 142

$d(\cdot, \cdot)$ Differenznorm von zwei Feldern; 54, 56–59, 61, 64, 66, 82, 83, 89, 105, 106, 122

$\overleftrightarrow{\nabla}$ Divergenzoperator, in kartesischen Koordinaten $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ als

$$\overleftrightarrow{\nabla} \vec{v} = \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial v_i}{\partial x_i}$$

für räumliche Vektoren und für $m \times n$ Flussmatrizen als

$$\overleftrightarrow{\nabla} \underline{f} = \left(\sum_{j=1}^n \frac{\partial f_{ij}}{\partial x_j} \right)_i = \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{\nabla} \vec{f}_1 \\ \vdots \\ \overleftrightarrow{\nabla} \vec{f}_m \end{pmatrix}$$

mit den Zeilenvektoren \vec{f}_i definiert; 5, 6, 8–15, 18, 35, 39–41, 52, 127, 152

E Realelement als ein Teil des Gesamtgebietes Ω in Koordinaten \vec{x} (Symbole für Energien dagegen immer mit Subskript); 14–17, 19–23, 32, 33, 55, 56, 64, 125, 130–135, 149, 150, 153

E_{ges} Gesamtenergie (Dichte oder Integral); 10, 68, 106

E_{kin} kinetische Energie (Dichte oder Integral); 10, 68, 106

E_{pot} potentielle Energie (Dichte oder Integral); 10, 68, 106

E_{th} innere/thermische Energie (Dichte oder Integral); 10, 68, 106

\vec{F} Funktion der Zeitableitung des diskretisierten Variablenvektors \vec{q} (rechte Seite der gewöhnlichen Differentialgleichung in der Zeit); 25–28, 52, 151

f_c Coriolisparameter, im β -Kanal mit β als Ableitung in der Kanalmitte und f_0 als Basiswert dort: $f_c(\vec{x}) = f_c(y) = f_0 + \beta y$; 4, 8, 9, 11–13, 39–44, 48–50, 55, 59, 149

\overline{f} Flussmatrix oder auch Flussfunktion, die für alle Systemvariablen und Raumrichtungen die zentrale Dynamik des Gleichungssystems enthält, im Allgemeinen sowohl Funktion der Systemvariablen als auch des Ortes; 5, 6, 16, 23, 32, 35, 36, 52, 56, 149

\hat{f} numerischer Fluss am Elementrand; 16, 32, 59, 125

\vec{f} Komponenten der Flussmatrix zu einer Variablen als Vektor (Fluss in jede Raumrichtung); 5, 6, 14–16, 18, 19, 24, 36, 55, 125, 153

\hat{f} Vektor des numerischen Flusses am Elementrand zu einer Variablen; 16, 18, 19, 24, 125

$(\cdot ? \cdot : \cdot)$ Kompakte Form von alternativen Werten eines Ausdrucks in Abhängigkeit von einer Bedingung, die sich am in verschiedenen Programmiersprachen (vor allem C und verwandte Sprachen) enthaltenen ternären Bedingungsoperator orientiert, der Zusammenhang „ a gleich 1, wenn b größer 0 und gleich 0, wenn nicht“ äquivalent zu den beiden Formen

$$a = (b > 0 ? 1 : 0)$$

und

$$a = b > 0 \begin{cases} ? & 1 \\ : & 0 \end{cases}$$

; 35, 120, 139

G Nachbarelement von E im globalen Bild; 15–17, 32, 33, 153

g als räumlich und zeitlich konstant angenommene Erdbeschleunigung, Standardwert in Polyflux $g = 9.086 \text{ m/s}^2$, bei Testfällen angepasst (z.B. $g = 9.81 \text{ m/s}^2$), im Kontext der Koordinatentransformation auch Gramsche Determinante; 8–13, 38–41, 49, 50, 137, 140

Γ Vereinigung aller Ränder von bzw. Grenzflächen zwischen Elementen im Modellgebiet;
125

γ Isentropenexponent $\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{1}{1-\kappa}$, für trockene Luft allgemein $\gamma \approx 1.4$ (berechnet aus Vorgabe von R und κ); 9, 10, 13, 82, 84

$\vec{\gamma}_E$ Transformation von $\vec{\chi}$ zu \vec{x}_{grid} ; 19–22, 25, 149

$\vec{\gamma}_{\text{grid}}$ Transformation von $\vec{\chi}$ zu \vec{x}_{grid} ; 21

$\vec{\gamma}_{\text{oro}}$ Transformation von \vec{x}_{res} zu \vec{x}_{oro} ; 21, 22

$\vec{\gamma}_{\text{res}}$ Transformation von \vec{x}_{grid} zu \vec{x}_{res} ; 21, 22

∇ Gradientenoperator, in kartesischen Koordinaten \vec{x} als

$$\nabla s = \left(\frac{\partial s}{\partial x_i} \right)_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial s}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial s}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

für Skalare und für Vektoren als Matrix mit Zeilenindex i und Spaltenindex j

$$\nabla \vec{f} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

definiert; 8, 11, 13–15, 18–20, 24, 36, 38–42, 48–50, 55, 125, 128, 130–134, 152

h Wasserhöhe vom Flachwasser oder Phasenverschiebung bei Profilen; 13, 77

K Anzahl von Basisfunktionen in einem Element; 15, 19, 25

k Polynomgrad der Basisfunktionen; v, 15–17, 20, 23, 24, 29, 51–54, 56–65, 69, 70, 83, 87, 88, 96, 98, 104, 117, 118, 124, 125

\vec{k} Einheitsvektor der Vertikalrichtung, in drei Dimensionen mit dritter Dimension in vertikaler Richtung $\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; 4, 8, 9, 11–13, 38–41, 49, 126, 127

κ $\kappa = \frac{R}{c_p} = 0.284$; 149, 151

\bar{L} Linearisierung von \vec{F} ; 27, 28

λ_s Maximale Signalgeschwindigkeit als bestimmender Parameter im numerischen Fluss; 16–18, 127, 129–134

L_x Länge der Dimension zur Variablen x ; 119, 120

m Anzahl lokaler Dimensionen (für Referenzelement D , formal von n unterschieden);
20

\overline{M} Massematrix der Basisfunktionen, üblicherweise beschränkt auf ein Gitterelement; 18, 19, 24, 55

$\{ \cdot \}$ Mittelwert einer doppelwertigen Größe auf einer Grenzfläche: $\{ a \} = 1/2(a_{\text{innen}} + a_{\text{außen}})$; 16, 127, 129–133

μ Diffusionskoeffizient; 36, 79, 81

N Anzahl von Elementen, mit Subskript Anzahl der Elemente in eine Koordinatenrichtung (N_x für Zahl der Elemente in x); 14, 15, 19, 21, 61

n Anzahl globaler Dimensionen (n mit Subskripten in verschiedener Anwendung als Index); 14, 15, 18–20, 24, 55, 122, 151

$\vec{\nabla}$ Vektor aus Ableitungsoperatoren zu kartesischen Koordinaten $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$,

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \end{pmatrix},$$

in mathematischen Teilen dieser Arbeit zur Verdeutlichung unterschieden von Gradientenoperator ∇ und Divergenzoperator $\nabla \cdot$; 79, 149

N_{brunt} Brunt-Vaisala-Frequenz; 70, 139, 140

$\vec{\nu}_D$ normierter Normalenvektor, der auf einer Grenzfläche des Referenzelementes D nach außen zeigt; 20, 21

$\vec{\nu}_E$ normierter Normalenvektor, der auf einer Grenzfläche des Realelementes E nach außen zeigt; 15–20, 24, 32, 33, 127, 129–135, 153

Ω gesamtes Modellgebiet (Volumen) mit Außenrandfläche $\partial\Omega$; 14, 15, 19, 125, 150

Ω_p Rotationsgeschwindigkeit des Planeten, für die Erde $\Omega_p = 7.292 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$; 4, 152

$\vec{\Omega}_p$ Rotationsvektor des Planeten, Betrag Ω_p ; 4, 8

p atmosphärischer Druck, auch p als Abweichung von p_0 ; 6, 7, 9–12, 29, 38–41, 49, 50, 56, 140

ϕ geographische Breite; 4

φ Basisfunktion der diskretisierten Darstellung, meist als Komponente φ_i eines Vektors von Basisfunktionen; 14–16, 18–20, 24, 25

$\vec{\varphi}$ Vektor der Basisfunktionen in einem Element bzw. im Gesamtgebiet; 15, 18, 19, 24, 55

p_r allgemeiner Referenzdruck, in Polyflux Vorgabewert $p_r = 1023 \text{ hPa}$; 7, 9–13, 140

\vec{q}_0 Vektor des Referenzzustandes der konservierten Systemvariablen; 11, 12, 127, 152

- \vec{q} Vektor der konservierten Systemvariablen als Funktion von Ort und Zeit, je nach Kontext bezogen auf die analytische Lösung oder die diskretisierte Approximation dieser, ebenso die volle Variable oder die Differenz zu einem Referenzzustand \vec{q}_0 , wenn das Gleichungssystem dies vorsieht; 5, 6, 11, 12, 14, 18, 19, 25, 32, 33, 35, 38, 52, 56, 125, 127, 128, 150, 152, 153
- \bar{q} Vektor aller Basiskoeffizienten zu \vec{q} ; 25–28
- ϑ eine einzelne Erhaltungsvariable, Komponente des Vektors \vec{q} mit zugehörigem Flussvektor \vec{f}_ϑ und rechter Seite r_ϑ ; 14–16, 18, 19, 24, 25, 32, 35, 36, 55, 56, 122, 123, 125–129, 133, 135, 137, 153
- R Gaskonstante für Luft als ideales Gas, ohne weitere Angabe mit Wert $R = c_p - c_v = 287 \text{ J/kg K}$; 6–8, 29, 50, 140, 149, 151
- r Rechte Seite (Quellterm) zu einer Variablen; 6, 14, 15, 18, 19, 24, 55, 125, 126, 128, 129, 153
- \vec{r} Vektor der rechten Seiten der Systemgleichungen in Flussform, Quellen und Senken; 6, 9, 23, 29, 35, 52, 55, 56, 59, 127, 128
- ρ Massendichte des betrachteten Mediums; 5–13, 18, 29, 33, 35, 38–41, 49, 56, 122, 126, 153
- R_p Radius des als Kugel genäherten Planeten, für die Erde $R_p = 6370 \text{ km}$; 4
- σ statische Stabilität (auch: Stärke der Absorptionsschicht $\vec{\sigma}_{sp}$, Flächenelement $d\sigma$ bei Integration); 140
- $d\sigma$ infinitesimales Flächenelement (für Randintegrale); 15, 16, 18, 19, 21, 24, 153
- $\vec{\sigma}_{sp}$ Stärkefaktoren für Absorptionsschicht, Komponente σ_ϑ für eine Systemvariable ϑ ; 35, 153
- $\llbracket \cdot \rrbracket$ Sprung einer Größe auf dem Rand von Element E (innen) zu Element G (außen):
 $\llbracket \vec{q} \rrbracket = (\vec{q}_E - \vec{q}_G) \otimes \vec{v}_E$, mit Skalar q auch einfach $\llbracket q \rrbracket = (q_E - q_G) \cdot \vec{v}_E$; 16, 125, 127–134
- T Temperatur; 6, 7, 41, 49, 50, 62, 88, 140
- t Zeitvariable; 6, 7
- $\cdot \otimes \cdot$ Tensorprodukt von zwei Vektoren, Definition einer Komponente der resultierenden Matrix: $(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a_i b_j$; 9, 11–13, 39, 56, 153
- Θ erhaltene potentielle Temperatur / potentielle Temperaturdichte $\Theta = \rho\vartheta$; 9–13, 33, 38–40, 56, 66, 147
- θ potentielle Temperatur; 7–10, 13, 33, 40, 69, 88, 90, 139, 140, 153
- T_r allgemeine Referenztemperatur, meist $T_r = 300 \text{ K}$; 7, 140

\cdot^T Transpositionoperator zur Vertauschung von Zeilen und Spalten von Vektoren,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^T = (x \ y \ z) ,$$

oder Matrizen; 6, 8–13, 15, 38, 56, 127

u skalare Windgeschwindigkeit (Komponente von \vec{u}), mitunter mit Index zur Identifikation mit Komponenten u , v oder w ; 8, 42, 47, 50, 51, 63, 77, 87, 89, 92, 96, 104

\vec{U} Impulsdichtevektor, Produkt aus Dichte und Windvektor $\vec{U} = \rho\vec{u}$ bzw. Wasserhöhe und Windvektor $\vec{U} = h\vec{u}$ bei Flachwasser; 9–13, 32, 33, 38–41, 56, 122, 123, 127

\vec{u} Windgeschwindigkeitsvektor, in drei Dimensionen $\vec{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$; 4–6, 8, 9, 13, 17, 18, 38–42, 49, 50, 77, 153

x eindimensionale globale Koordinate; 14, 15, 18, 19, 21, 24, 55, 122, 151, 154

x_{grid} eindimensionale virtuelle globale Koordinate in einem Einheitsintervall; 21, 22

\vec{x}_{grid} virtueller globaler Koordinatenvektor in einem Einheitsintervall; 151

x_{oro} eindimensionale globale Koordinate nach Anwendung der Orographie (identisch mit x); 22

\vec{x}_{oro} globaler Koordinatenvektor nach Anwendung der Orographie (identisch mit \vec{x}); 151

x_{res} eindimensionale virtuelle globale Koordinate im Einheitsintervall nach Anwendung der variablen Auflösung; 22

\vec{x}_{res} virtueller globaler Koordinatenvektor im Einheitsintervall nach Anwendung der variablen Auflösung; 22, 151

\vec{x} globaler Koordinatenvektor; 5, 6, 15, 19, 20, 22, 25, 33, 35, 122, 125, 126, 150

ζ (relative) Vorticity; 77

Abkürzungen und Begriffe

- BDF2A "Backward Difference Formula" der Ordnung 2 in Variante A, eingesetztes numerisches Schema zur semi-impliziten Zeitintegration; v, 28, 65
- CFL Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium (Bezeichnung eines Kriterium für maximalen stabilen Zeitschritt in Abhängigkeit vom Verhältnis von Gitterweite und Geschwindigkeit); 26, 29, 30, 98, 117
- CRM Cloud Resolving Model (Atmosphärenmodell zur Untersuchung von (lokaler) Wolkendynamik); 1
- DG Discontinuous Galerkin (übliche englische Bezeichnung für unstetige Galerkin - Diskretisierung, kurz DG); 1–3, 12, 14, 16, 17, 22, 26, 27, 36, 52, 53, 65, 69, 70, 73, 77, 90, 117, 118, 122, 124, 147, 155
- GCM General Circulation Model (globales Modell der atmosphärischen Zirkulation, bestehend aus dynamischem Kern und Modellierung bzw. Parametrisierung von weiteren physikalischen oder chemischen Prozessen, auch gekoppelt mit Modellen von Ozean oder Landvegetation); 1, 118
- GMRES "Generalized Minimum Residual Method", Iterationsverfahren, dass zur Lösung des impliziten Anteils im semi-impliziten Zeitschrittverfahren genutzt wird, siehe Saad und Schultz (1986); 29, 31, 126, 128, 129
- Polyflux die Referenzimplementierung der in dieser Arbeit beschriebenen Methodik in Fortran 95 first; 118, 147, 150, 152
- RCM Regional Climate Model (Klimamodell einer beschränkten Region in hoher Auflösung); 1
- RK22 SSPRK der Ordnung 2 mit 2 Stufen; 26, 27
- RK35 SSPRK der Ordnung 3 mit 5 Stufen; 26, 27
- RKDG Runge-Kutta Discontinuous Galerkin (Kombination von DG im Raum mit Runge-Kutta-Verfahren in der Zeit); 26, 29
- SI Système international d'unités (das metrische Internationale Einheitensystem); 4, 5
- SSPRK Strong Stability-Preserving Runge-Kutta (Klasse von optimalen Runge-Kutta-Zeitschrittverfahren in Bezug auf Stabilität und Effizienz); 26, 155

Literatur

- Arakawa, A. (2004): *The Cumulus Parameterization Problem: Past, Present, and Future*. Journal of Climate 17.13, S. 2493–2525. doi: 10.1175/1520-0442(2004)017<2493:RATCPP>2.0.CO;2.
- Borland, D. und R. M. Taylor II (2007): *Rainbow Color Map (Still) Considered Harmful*. IEEE Comput. Graph. Appl. 27.2, S. 14–17. ISSN: 0272-1716. doi: 10.1109/MCG.2007.323435.
- Bronstein, I. N., K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Muehlig (2001): *Taschenbuch der Mathematik*. 5. Aufl. Thun, Frankfurt am Main: Harri Deutsch Verlag. ISBN: 978-3-817-12007-9.
- Burbeau, A., P. Sagaut und C.-H. Bruneau (2001): *A Problem-Independent Limiter for High-Order Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Methods*. Journal of Computational Physics 169.1, S. 111–150. ISSN: 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2001.6718>.
- Cockburn, B. (1998): *An introduction to the Discontinuous Galerkin method for convection-dominated problems*. Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations. Hrsg. von A. Quarteroni. Bd. 1697. Lecture Notes in Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, S. 151–268. ISBN: 978-3-540-64977-9. doi: 10.1007/BFb0096353.
- COESA (1976): *U.S. Standard Atmosphere, 1976*. Washington, D.C.: NOAA, NASA, USAF.
- Dethloff, K., A. Rinke, R. Lehmann, J. H. Christensen, M. Botzet und B. Machenhauer (1996): *Regional climate model of the Arctic atmosphere*. Journal of Geophysical Research 101.D18, S. 23401–23422. doi: 10.1029/96JD02016.
- Durrant, D. R. und J. B. Klemp (1983): *A Compressible Model for the Simulation of Moist Mountain Waves*. Monthly Weather Review 111, S. 2341–2361.
- Eady, E. T. (1949): *Long Waves and Cyclone Waves*. Tellus 1.3, S. 33–52. doi: 10.1111/j.2153-3490.1949.tb01265.x.
- Etling, D. (2008): *Theoretische Meteorologie*. 3. Aufl. Springer Berlin Heidelberg New York. ISBN: 978-3-540-75978-2.
- Evans, L. C. (1998): *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society. ISBN: 0-8218-4974-3.
- Galewsky, J., R. K. Scott und L. M. Polvani (2004): *An initial-value problem for testing numerical models of the global shallow-water equations*. Tellus A 56.5, S. 429–440. doi: 10.1111/j.1600-0870.2004.00071.x.
- Giraldo, F. X. (2005): *Semi-implicit time-integrators for a scalable spectral element atmospheric model*. Q. J. R. Meteorol. Soc. 131.610, S. 2431–2454. doi: 10.1256/qj.03.218.

- Giraldo, F. X., J. Hesthaven und T. Warburton (2002): *Nodal High-Order Discontinuous Galerkin Methods for the Spherical Shallow Water Equations*. Journal of Computational Physics 181.2, S. 499–525. doi: 10.1006/jcph.2002.7139.
- 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 227.8, S. 3849–3877.
- Giraldo, F. X., M. Restelli und M. Läuter (2010): *Semi-Implicit Formulations of the Navier–Stokes Equations: Application to Nonhydrostatic Atmospheric Modeling*. SIAM Journal on Scientific Computing 32.6, S. 3394–3425. doi: 10.1137/090775889.
- Hall, D. M. und R. D. Nair (2013): *Discontinuous Galerkin Transport on the Spherical Yin-Yang Overset Mesh*. Monthly Weather Review 141.1, S. 264–282. doi: 10.1175/MWR-D-12-00108.1.
- Holton, J. R. (2004): *An Introduction to Dynamic Meteorology*. 4. Aufl. Amsterdam, Boston: Academic Press. ISBN: 978-0-123-54015-7.
- IEEE (2008): 754-2008 - *IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic*. doi: 10.1109/IEEESTD.2008.4610935.
- ISO (1997): *ISO/IEC 1539-1:1997 — Fortran — Part 1: Base language*. http://www.iso.org/iso/catalogue_detail?csnumber=26933.
- ISO (2001): *ISO/IEC TR 15581:2001 — Fortran — Enhanced data type facilities*. http://www.iso.org/iso/catalogue_detail?csnumber=34367.
- 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 (621C), S. 2943–2975. doi: 10.1256/qj.06.12.
- Janert, P. K., C. D. Kelley und T. Williams (2009): *Gnuplot in Action - Understanding Data With Graphs*. Birmingham: Manning Publications Company. ISBN: 978-1-933-98839-9.
- Kahan, W. (1965): *Pracniques: further remarks on reducing truncation errors*. Communications of the ACM 8.1, S. 40. doi: 10.1145/363707.363723.
- Kelly, J. F. und F. X. Giraldo (2012): *Continuous and discontinuous Galerkin methods for a scalable three-dimensional nonhydrostatic atmospheric model: Limited-area mode*. Journal of Computational Physics 231.24, S. 7988–8008. doi: 10.1016/j.jcp.2012.04.042.
- Kirby, R. M. und G. E. Karniadakis (2005): *Selecting the Numerical Flux in Discontinuous Galerkin Methods for Diffusion Problems*. Journal of Scientific Computing 22-23.1-3, S. 385–411. doi: 10.1007/s10915-004-4145-5.
- Klemp, J. B. und D. K. Lilly (1978): *Numerical Simulation of Hydrostatic Mountain Waves*. Journal of the Atmospheric Sciences 35, S. 78–107.
- Kubatko, E. J., C. Dawson und J. J. Westerink (2008): *Time step restrictions for Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods on triangular grids*. Journal of Computational Physics 227.23, S. 9697–9710. doi: 10.1016/j.jcp.2008.07.026.

- Läuter, M., F. X. Giraldo, D. Handorf und K. Dethloff (2008): *A Discontinuous Galerkin Method for the Shallow Water Equations in Spherical Triangular Coordinates*. Journal of Computational Physics 227.24, S. 10226–10242. doi: 10.1016/j.jcp.2008.08.019.
- Leer, B. van (1977): *Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection*. Journal of Computational Physics 23.3, S. 276–299. doi: 10.1016/0021-9991(77)90095-X.
- Leer, B. van (1979): *Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method*. Journal of Computational Physics 32.1, S. 101–136. doi: 10.1016/0021-9991(79)90145-1.
- Nair, R. D., S. J. Thomas und R. D. Loft (2005): *A Discontinuous Galerkin Global Shallow Water Model*. Monthly Weather Review 133.4, S. 876–888. doi: 10.1175/MWR2903.1.
- Norbury, J. und I. Roulstone (2002): *Large-Scale Atmosphere-Ocean Dynamics I*. Cambridge University Press, Cambridge. ISBN: 0-521-80681.
- Persson, P.-O. und J. Peraire (2006): *An Efficient Low Memory Implicit DG Algorithm for Time Dependent Problems*. Proceedings of the 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting. John Wiley & Sons.
- Pinty, J.-P., R. Benoit, E. Richard und R. Laprise (1995): *Simple Tests of a Semi-Implicit Semi-Lagrangian Model on 2D Mountain Wave Problems*. Monthly Weather Review 123.
- Polvani, L. M., R. K. Scott und S. J. Thomas (2004): *Numerically Converged Solutions of the Global Primitive Equations for Testing the Dynamical Core of Atmospheric GCMs*. Monthly Weather Review 132, S. 2539–2552.
- Reed, W. H. und T. R. Hill (1973): *Triangular mesh methods for the neutron transport equation*. Techn. Ber. LA-UR-73-479. Los Alamos Scientific Laboratory.
- Robert, A. (1993): *Bubble Convection Experiments with a Semi-implicit Formulation of the Euler Equations*. Journal of the Atmospheric Sciences 50.13. doi: 10.1175/1520-0469(1993)050<1865:BCEWAS>2.0.CO;2.
- Rummukainen, M. (2010): *State-of-the-art with regional climate models*. Wiley Interdisciplinary Reviews: Climate Change 1.1, S. 82–96. ISSN: 1757-7799. doi: 10.1002/wcc.8.
- Saad, Y. und M. Schultz (1986): *GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems*. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing 7.3, S. 856–869. doi: 10.1137/0907058.
- Schwetlick, H. und H. Kretzschmar (1991): *Numerische Verfahren für Naturwissenschaftler und Ingenieure: eine computerorientierte Einführung*. Leipzig: Fachbuchverlag Leipzig. ISBN: 3-343-00580-0.
- Shannon, C. E. (1949): *Communication in the Presence of Noise*. Proceedings of the IRE 37.1, S. 10–21. doi: 10.1109/JRPROC.1949.232969.
- Skamarock, W. C. und J. B. Klemp (1994): *Efficiency of the Klemp-Wilhelmson Time-Splitting Technique*. Monthly Weather Review 122, S. 2623–2630.

- Spiteri, R. und S. Ruuth (2002): *A New Class of Optimal High-Order Strong-Stability-Preserving Time Discretization Methods*. SIAM Journal on Numerical Analysis 40.2, S. 469–491. doi: 10.1137/S0036142901389025.
- Stevens, B. et al. (2013): *Atmospheric component of the MPI-M Earth System Model: ECHAM6*. Journal of Advances in Modeling Earth Systems 5.2, S. 146–172. issn: 1942-2466. doi: 10.1002/jame.20015.
- Thompson, A. und B. N. Taylor (2008): *Guide for the Use of the International System of Units (SI)*. Techn. Ber. 811. National Institute of Standards und Technology.
- Toro, E. (2009): *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. 3. Aufl. Springer Dordrecht Heidelberg London New York. isbn: 9783540498346. doi: 10.1007/b79761.
- Torrence, C. und G. P. Compe (1998): *A Practical Guide to Wavelet Analysis*. Bulletin of the American Meteorological Society 79.1, S. 61–78. doi: 10.1175/1520-0477(1998)079<0061:APGTWA>2.0.CO;2.
- Vallis, G. K. (2006): *Atmospheric and Oceanic Fluid Dynamics - Fundamentals and Large-scale Circulation*. Cambridge: Cambridge University Press. isbn: 978-1-139-45996-9.
- Williamson, D. L., J. B. Drake, J. J. Hack, R. Jakob und P. N. Swarztrauber (1992): *A Standard Test Set for Numerical Approximations to the Shallow Water Equations in Spherical Geometry*. Journal of Computational Physics 100, S. 211–224.
- Wu, X. und X. Li (2008): *A review of cloud-resolving model studies of convective processes*. Advances in Atmospheric Sciences 25.2, S. 202–212. doi: 10.1007/s00376-008-0202-6.
- Zhang, X. und C.-W. Shu (2011): *Positivity-preserving high order discontinuous Galerkin schemes for compressible Euler equations with source terms*. J. Comput. Phys. 230.4, S. 1238–1248. issn: 0021-9991. doi: 10.1016/j.jcp.2010.10.036.

Danksagung und Erklärung

Danksagung

Ich danke natürlich zu allererst meinen Betreuern Herrn Prof. Dr. Klaus Dethloff, Frau Dr. Dörthe Handorf und Herrn Dr. Matthias Läuter, die mir diese Dissertation am Alfred-Wegener-Institut ermöglicht haben und auch auf Langstreckenflügen nicht müde wurden, meine Arbeit zu prüfen und selbige mit Kritik voranzubringen. In schwierigen Zeiten haben wir alle letztlich die nötige Ausdauer bewiesen.

Ich danke den Kollegen, die es nicht schafften, sich vor meinen abseitigen und manchmal in Fragen mündenden Gedankengängen in Sicherheit zu bringen. Herr Dr. Wolfgang Dorn stand mir mit seinem meteorologischen Sachverstand vorwiegend in den Abendstunden zur Seite. Die moralische Unterstützung des Kollegiums war wertvoll, ohne nun aus den zahlreichen Weggefährten einzelne hervorzuheben und andere sträflich zu ignorieren. Eine Nennung hat dennoch Frau Anja Sommerfeld für die Bereitschaft zum Lektorat in letzter Minute verdient.

Die Arbeitsgruppe Photovoltaik an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg hat sich getraut, mir für 1.5 Jahre eine Existenz als Wissenschaftler zu ermöglichen und es ertragen, dass ich mich gleichzeitig in der Halbleiterphysik und der Atmosphärenphysik auf schmalen Grat bewegte (schlussendlich aber in beidem erfolgreich, behaupte ich). Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Dr. Scheer und Herrn Dr. Heiko Kempa für ihr Vertrauen, bei der gesamten Gruppe bis hin zu den inzwischen auch gestandenen Doktoranden auch für schöne Momente.

Dank gebührt ebenfalls meiner Familie, die sich mit Supportanfragen ob der Arbeitsbelastung bisweilen zurückhielt, neben der Tatsache, dass ich meinen Eltern meine Existenz und bis heute nicht unerhebliche Unterstützung verdanke. Im Besonderen bedanke ich mich bei der Musik und allen, die immer wieder versuchen, gegen mein Schlagzeug akustisch zu bestehen, für die immens wichtige Kanalisation kreativen Frustes.

Ich hoffe, ich habe die Empfehlung von Prof. Dr. Francis Xavier Giraldo umsetzen können:

„You have to put a spin on it!“

Und ja, Heidrun: Sie kann laufen. Ich weiß. Schon lange.

Erklärung

Ich versichere, diese Arbeit selbstständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Weiterhin versichere ich, dass diese Arbeit an keiner anderen Hochschule eingereicht wurde.

Potsdam, den 23. November 2013

Thomas Orgis