

Institut für Meteorologie und Klimatologie
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

**Entwicklung und Optimierung
numerischer Verfahren
höherer Ordnung
und ihre Implementierung
im LES-Modell PALM**

Diplomarbeit im Fach Meteorologie

von
Matthias Sühning

Oktober 2010

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	III
Symbolverzeichnis	V
1 Einleitung	1
2 Large-Eddy Simulation	4
2.1 Beschreibung turbulenter Strömungen	4
2.2 Grundgleichungen	6
2.3 Filterung der Modellgleichungen	8
2.4 Subskalenmodell	9
2.5 Diskretisierung und numerische Lösung der Modellgleichungen	11
2.5.1 Diskretisierung im Raum	11
2.5.2 Diskretisierung in der Zeit	13
2.6 Rand- und Anfangsbedingungen	14
2.7 Parallelisierung	16
2.8 Programmstruktur	17
3 Advektionsverfahren höherer Ordnung	19
3.1 Eigenschaften verschiedener Advektionsverfahren	19
3.2 Advektionsverfahren höherer Ordnung von Wicker-Skamarock	22
3.2.1 Numerische Eigenschaften	23
3.2.2 Advektionstests	26
3.3 Einfluss von Diskretisierungsfehlern auf das Subskalenmodell	31
3.4 Kontrolle der numerischen Dissipation	32
4 Implementierung	39
4.1 Grundlegende Änderungen	39
4.2 Neue Advektionsmodule	42
4.3 Weitere Anpassungen	43
5 Validierung des Advektionsverfahrens fünfter Ordnung mit PALM	45
5.1 Verlagerung eines Rankine-Wirbels	45
5.2 Vertikaladvektion	48
5.3 Statistische Auswertung turbulenter Flüsse	52
5.4 Simulation einer trockenen neutralen Grenzschicht	56
5.5 Simulation einer trockenen konvektiven Grenzschicht	59
5.6 Modellvergleich - BOMEX	63
6 Zusammenfassung und Ausblick	67

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung eines Energiespektrums in der atmosphärischen Grenzschicht	5
2.2	Arakawa-C Gitter	12
2.3	Virtuelle Prozessortopologie	17
3.1	Dispersions- und Dissipationseigenschaften	24
3.2	Stabilität in Verbindung mit Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung .	25
3.3	Anfangszustand und analytische Lösung des zweidimensionalen Testfalls	27
3.4	Numerische Lösung des eindimensionalen Testfalls	28
3.5	Numerische Lösung des zweidimensionalen Testfalls	29
3.6	Auswirkung des Dissipationsterms auf die numerische Lösung	30
3.7	Fehler in der $\ L\ _2$ -Norm	30
3.8	Konvergenzraten	31
3.9	Advektionstest mit WS5, Isoliniendarstellung	34
3.10	Advektionstest mit WS6, Isoliniendarstellung	35
3.11	Advektionstest mit WS5 in Verbindung mit der Dissipationskontrolle D1, Isoliniendarstellung	35
3.12	Advektionstest mit WS5 in Verbindung mit der Dissipationskontrolle D2, Isoliniendarstellung	36
3.13	Advektionstest mit WS5 in Verbindung mit der Dissipationskontrolle D3, Isoliniendarstellung	36
3.14	Veränderung der Dispersions- und Dissipationseigenschaften durch die Dissipationskontrolle	38
4.1	Schematische Darstellung des Datentransfers	41
4.2	Benötigte CPU Zeit für den Geisterrandaustausch	42
4.3	Schematische Darstellung der räumlichen Verteilung numerischer Flüsse	43
5.1	Anfangszustand des Rankine-Wirbels	46
5.2	Advektion eines Rankine-Wirbels	47
5.3	Advektion eines Rankine-Wirbels in Verbindung mit der Dissipationskontrolle	48
5.4	Spiegelungsrandbedingungen	49
5.5	Profile abhängig von den Geisterrandwerten	49
5.6	Profile unabhängig von den Geisterrandwerten	50
5.7	Vertikale Flüsse	53
5.8	Vertikalprofile der potentiellen Temperatur und der u-Komponente der Geschwindigkeit	53
5.9	Vertikale Flüsse - Modifizierte Berechnung	54
5.10	Vertikale Flüsse, Vergleich der statistischen Auswertung	55

5.11 Spektrale Dichte der Geschwindigkeitskomponenten	57
5.12 Vertikalprofile der TKE und des turbulenten Diffusionskoeffizienten . .	58
5.13 Spektrale Dichte der potentiellen Temperatur	60
5.14 Vertikalprofile der potentiellen Temperatur, der potentiellen Tempera- turvarianz und des vertikalen Temperaturflusses	61
5.15 Vertikalprofile der TKE und des vertikalen Impulsflusses	62
5.16 BOMEX - Totale Wolkenbedeckung	64
5.17 BOMEX - Gesamtwassergehalt	65
5.18 BOMEX - Vertikalprofile	65

Symbolverzeichnis

Abkürzungen

CFL	Courant-Friedrichs-Lewy (Zeitschrittkriterium)
D1	Dissipationskontrolle von Tajallipour et al. (2009)
D2	Dissipationskontrolle von Sjögreen und Yee (2004)
D3	Dissipationskontrolle basierend auf lokaler Varianz
DNS	Direkte Numerische Simulation
LES	Large-Eddy Simulation
MPI	Message Passing Interface
PALM	Parallelisiertes Large-Eddy Simulation Model
PW	Piacsek-Williams Verfahren
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RB	Randbedingung
RK3	Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung
TKE	Turbulente kinetische Energie
WS3	Verfahren von Wicker-Skamarock dritter Ordnung
WS4	Verfahren von Wicker-Skamarock vierter Ordnung
WS5	Verfahren von Wicker-Skamarock fünfter Ordnung
WS6	Verfahren von Wicker-Skamarock sechster Ordnung

Lateinische Symbole

A	Numerischer Verstärkungsfaktor
C_{Diss}	Konstante für Dissipationskontrolle D3
c_m	Smagorinsky-Konstante
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
C_r	Courant-Zahl
d	Abstand zur nächsten festen Oberfläche
d_j^m	Interpolationsfehler zwischen verschiedenen groben Gittern
e	Subskalige turbulente kinetische Energie
f_i	Coriolisparameter, $i \in \{1, 2, 3\}$

f_j^n	Flussdivergenz der Ordnung n
f_{dt}	Sicherheitsfaktor für das Zeitschrittkriterium
$f_{stretch}$	Faktor für die Gitterstreckung
$F_{i\pm\frac{1}{2}}$	Numerischer Fluss an den Rändern der Gitterbox
$F_{i\pm\frac{1}{2}}^{Diss}$	Dissipativer numerischer Fluss an den Rändern der Gitterbox
g	Erdbeschleunigung
G	Analytische Filterfunktion
H_k	Subskaliger Temperaturfluss, $k \in \{1, 2, 3\}$
i	Vektorindex; komplexe Zahl
j, k	Vektorindizes
$k_{stretch}$	Index, für den die vertikale Gitterstreckung beginnt
K_m, K_h	Turbulente Diffusionskoeffizienten für Impuls und Temperatur
KR	Konvergenzrate
l	Mischungsweglänge
l_v	Verdunstungswärme
L	Charakteristische Längenskala einer Strömung; Monin-Obukhov-Länge
N_{Gitter}	Gitterpunktsanzahl
N^{lokal}	Anzahl der Gitterpunkte die in Berechnung der lokalen Varianz für D3 eingehen
N_{x_i}	Anzahl der Gitterpunkte in einer Raumrichtung $i \in \{1, 2, 3\}$
p	Druck
q	Gesamtwassergehalt
q_l	Flüssigwassergehalt
q_v	spezifische Feuchte
Q_h, Q_s	Quellen und Senken der Temperatur bzw. der skalaren Größe
r_j^m	Maximaler Interpolationsfehler zwischen verschiedenen groben Gittern
Re	Reynoldszahl
R	Spezifische Gaskonstante
s	Skalare Größe
S	Spektrale Energiedichte
t	Zeit
T	Lufttemperatur
u, v, w, u_i	Komponenten des Windvektors, $i \in \{1, 2, 3\}$
$u_{i,max}$	Maximale Geschwindigkeitskomponente
u_{k_g}	Komponente des geostrophischen Windvektors, $k \in \{1, 2\}$
u_*	Schubspannungsgeschwindigkeit

U	Charakteristische Geschwindigkeit einer Strömung
V	Gittervolumen
W_k	Subskaliger Fluss eines Skalars, $k \in \{1, 2, 3\}$
x, y, z, x_i	Kartesische Koordinaten, $i \in \{1, 2, 3\}$

Griechische Symbole

α_i	Runge-Kutta Koeffizienten; Parameter für D2
β_i	Runge-Kutta Koeffizienten
γ	Wichtungsfaktor für die Dissipationskontrolle
δ_{ij}	Kronecker-Symbol
Δ	Charakteristische Gitterweite
$\bar{\Delta}$	Abschneidelänge, Filterlänge
Δt	Zeitschritt
Δt_{eff}	effektive Filterweite
Δt_{CFL}	Zeitschritt nach dem CFL-Kriterium
Δt_{Diff}	Zeitschritt nach dem Diffusionskriterium
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Gitterweite in x-, y- und z-Richtung
ϵ	Dissipationsrate
ϵ_{ijk}	Alternierender Einheitstensor, $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$
ζ	Vorticity
η	Kolmogorov-Länge
θ	Potentielle Temperatur
θ_l	Potentielle Flüssigwassertemperatur
θ_v	Potentielle virtuelle Temperatur
κ	Wellenzahl
κ'	Kármánsche Konstante
κ_{eff}	Effektive Wellenzahl
λ	Bestimmungsparameter für den numerischen Dissipationsterm zweiter Ordnung bei der Vertikaladvektion
ν	Kinematische Viskosität
ν_m, ν_h, ν_s	Molekulare Diffusionskoeffizienten für Impuls, Temperatur und Skalare
ρ	Dichte
Σ	Summe
$\sigma_\psi^{\text{lokal}}$	Parameter für D3
$\overline{\sigma_\psi}$	Parameter für D3

τ_{ki}	Subskaliger Stresstensor, $k, i \in \{1, 2, 3\}$
φ	Geographische Breite
ϕ	Beliebiger Randwert
χ	Parameter für D1
ψ	Atmosphärische und Numerische Variable
$\hat{\psi}$	Fouriertransformierte einer Größe
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erde
$\partial\Omega$	Menge aller Randelemente

Mittelungen und Indizes angewandt auf eine Variable ψ

ψ_0	Grundzustand (Boussinesq-Approximation)
ψ^*	Abweichung vom Grundzustand (Boussinesq-Approximation)
$\bar{\psi}$	Gefilterte Variable
ψ'	Turbulenzsignal

Operatoren

∂	Partieller Differentialoperator
$ \cdot $	Betrag eines Vektors oder Skalars
$\ \cdot\ $	Fehler-Norm
\int	Integral-Operator

1 Einleitung

Advektionsprozesse sind für atmosphärische Strömungen von fundamentaler Bedeutung für den räumlichen Austausch von Impuls und Skalaren. Bei der numerischen Simulation der atmosphärischen Grenzschicht entstehen bei der Diskretisierung der Advektionsterme Fehler, welche die physikalischen Prozesse maßgeblich beeinflussen können. Das Ziel dieser Arbeit ist die Weiterentwicklung und Implementierung eines Advektionsschemas höherer Ordnung in dem **parallelisierten Large-Eddy-Simulations Modell PALM**, um die physikalischen Prozesse in der atmosphärischen Grenzschicht besser beschreiben zu können.

Die atmosphärische Grenzschicht ist der unterste Teil der Troposphäre, in der der Einfluss der Erdoberfläche durch Reibung und Erwärmung bzw. Abkühlung direkt wahrnehmbar ist. Durch turbulente Flüsse von Impuls und Skalaren findet ein vertikaler Austausch statt, woraus sich für jede Situation charakteristische Vertikalprofile der Windgeschwindigkeit, Temperatur und Feuchte ergeben (Kraus, 2008). Die atmosphärische Grenzschicht lässt sich in drei Einzelschichten untergliedern. Am Boden ist die nur wenige Millimeter dicke viskose Unterschicht zu finden, in der Wärme sowie Feuchte ausschließlich durch molekulare Diffusion transportiert werden. Darüber schließt sich die Prandtl-Schicht an, die eine vertikale Erstreckung zwischen 20 und 100 m aufweist. Turbulente Flüsse sind in der Prandtl-Schicht annähernd höhenkonstant. Der Einfluss der Corioliskraft ist gering, sodass kaum eine Winddrehung mit der Höhe erfolgt. Oberhalb der Prandtl-Schicht befindet sich die Ekman-Schicht. Diese erstreckt sich bis zur Obergrenze der atmosphärischen Grenzschicht in etwa ein bis zwei Kilometern Höhe. Turbulente Flüsse nehmen in der Ekman-Schicht mit der Höhe ab und verschwinden mit dem Übergang zur freien Atmosphäre fast vollständig (Etling, 2002).

Es lassen sich drei Grundtypen der atmosphärischen Grenzschicht unterscheiden. Die rein dynamische Grenzschicht, oder auch neutrale Grenzschicht genannt, lässt sich allein durch die Bewegungsgleichungen beschreiben und zeichnet sich durch einen adiabatischen Temperaturgradienten aus. Vorzufinden ist die neutrale Grenzschicht oftmals unter starker Bewölkung bei hohen Windgeschwindigkeiten. Wie in der neutralen Grenzschicht, wird in der stabilen Grenzschicht die Turbulenz allein durch Windscherung produziert. Die stabile Grenzschicht zeichnet sich durch eine Zunahme der potentiellen Temperatur mit der Höhe aus und ist oftmals nur wenige Hundert Meter dick. Dieser Typ Grenzschicht entsteht meist nachts durch Ausstrahlung am Boden. Des Weiteren gibt es die konvektive Grenzschicht, die durch eine bodennahe, labil geschichtete Prandtl-Schicht, eine darüberliegende gut durchmischte Schicht und eine nach oben abschließende Inversion gekennzeichnet ist. Durch Erwärmung am Boden wird Turbulenz vorwiegend durch Auftriebskräfte produziert.

Vor allem in der neutralen und der konvektiven Grenzschicht sind Advektionsprozesse von großer Bedeutung. Ein Einfluss von Advektionsschemen auf die Simulation einer atmosphärischen Grenzschicht ist vor allem in der Nähe großer Gradienten gegeben. So vermuten Stevens et al. (1999) eine explizite Abhängigkeit der Entrainmentflüsse von dem verwendeten Advektionsschema. Nach Brown et al. (2000) hängt die Produktion von Turbulenzenergie durch Scherung entscheidend von der Genauigkeit der Approximation der Advektionsterme ab. Durch Finite-Differenzen Approximation der Advektionsterme entstehen Diskretisierungsfehler, welche einen Einfluss auf kleinere Turbulenzskalen besitzen (Glendening und Haack, 2001). Bei der Large-Eddy Simulation (LES) wird eine Skalentrennung zwischen den großen energietragenden und den kleinen energiearmen isotropen Skalen vollzogen. Die großen Skalen werden dazu explizit aufgelöst, wohingegen die kleinen Skalen durch ein Subskalenmodell modelliert werden. Die für die Skalentrennung erforderliche räumliche Filterung der Modellgleichungen wird nicht nur durch die implizite Filterung des Gitters, sondern auch durch Diskretisierungsfehler beeinflusst. Diese wirken wie ein zusätzlicher Filter mit der effektiven Filterweite Δ_{eff} . Nach Sengupta und Nair (1999) hängt die Simulation turbulenter Strömungen bei hohen Reynolds-Zahlen maßgeblich von der effektiven Filterung des Advektionsschemas ab. Dabei können die Diskretisierungsfehler in der Größenordnung der subskaligen Flüsse liegen, wodurch das Energiespektrum bei hohen Wellenzahlen verfälscht wird und auch die subskaligen Flüsse beeinflusst werden (Kravchenko und Moin, 1996). Diskretisierungsfehler werden in Dissipationsfehler und Dispersionsfehler unterschieden. Dissipationsfehler wirken stabilisierend auf die numerische Lösung, verursachen aber eine numerisch bedingte Diffusion, welche kleinskalige Strukturen dämpft. Dispersionsfehler führen hingegen zu numerischen Oszillationen und beeinflussen so den physikalischen Energietransfer von großen zu kleinen Turbulenzskalen (Glendening und Haack, 2001). Durch Verwendung von Advektionsschemen höherer Ordnung wird im Allgemeinen die effektive Filterweite verringert und Strukturen besser durch die Diskretisierung aufgelöst. Zentrierte Advektionsschemen besitzen keine Dissipationsfehler. Jedoch wirkt sich dies negativ auf die Stabilitätseigenschaften der numerischen Lösung aus, sodass Schemen höherer Ordnung meist nur in Verbindung mit numerischer Dissipation verwendet werden können (Durran, 1999). Dadurch werden jedoch Eigenschaften des Subskalenmodells durch die Diskretisierung nachgeahmt, was zu einer Modifikation der subskaligen Flüsse führt (Brown et al., 2000). Daher ist die Verwendung dissipativer Schemen in LES bislang umstritten. So sind nach Park et al. (2004) dissipative Schemen für LES ungeeignet, da vor allem in der Nähe fester Berandungen die numerische Dissipation in derselben Größenordnung wie die physikalisch Modellierete liegt. Brown et al. (2000) sowie Otte und Wyngaard (2001) stellen hingegen einen positiven Effekt numerischer Dissipation auf die Simulation von Entrainmentprozessen fest.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Einfluss von Diskretisierungsfehlern auf die Simulation physikalischer Prozesse untersucht. Dazu werden ausgewählte Simulationen mit dem bisher in **PALM** verwendeten Advektionsschema zweiter Ordnung von Piacsek und Williams (1970) (PW) und dem dissipativen Schema fünfter Ordnung von Wicker und Skamarock (2002) (WS5) durchgeführt und deren Ergebnisse miteinander verglichen. Dabei wird vorrangig auf die Interaktion zwischen Diskretisierungsfehlern und dem Subskalenmodell eingegangen, um die Zusammenhänge besser verstehen zu

können. Des Weiteren wird versucht, WS5 durch eine geeignete Kontrolle der numerischen Dissipation zu verbessern, um somit den Einfluss auf das Subskalenmodell reduzieren zu können. Dazu soll die numerische Dissipation numerische Oszillationen dämpfen und stabilisierend auf die numerische Lösung wirken, gleichzeitig aber eine Dämpfung der eigentlichen turbulenten Strukturen vermieden werden. Der Einfluss der Dissipationskontrolle auf Simulationsergebnisse wird anhand einer konvektiven Grenzschicht untersucht.

Der Aufbau dieser Arbeit gliedert sich wie folgt. Zunächst wird in Kapitel 2 eine Einführung über Turbulenz in der atmosphärischen Grenzschicht sowie deren numerische Simulation gegeben. Darauf folgt eine Beschreibung der in dieser Arbeit verwendeten physikalischen und numerischen Aspekte des LES-Modells **PALM**. Ein Überblick der in **PALM** verwendeten Parallelisierungsstrategie sowie die Programmstruktur folgt anschließend.

In Kapitel 3 ist eine Übersicht verschiedener Diskretisierungsansätze des Advektionsterms und deren generelle Eigenschaften zu finden. Im Anschluss daran wird das Verfahren 5. Ordnung von Wicker und Skamarock (2002) vorgestellt und dessen numerische Eigenschaften genauer analysiert. Danach werden Ergebnisse idealisierter Advektionstests vorgestellt. Bevor Methoden zur Kontrolle der numerischen Dissipation vorgestellt und anhand idealisierter Advektionstests getestet werden, wird der Einfluss von Diskretisierungsfehlern auf das Subskalenmodell und die sich daraus ergebende Motivation zur Kontrolle der numerischen Dissipation herausgearbeitet.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Implementierung von WS5 in **PALM**, die sich damit ergebenden Änderungen im Quellcode sowie die Optimierung der Advektionsmodule werden in Kapitel 4 beschrieben.

Die Validierung von WS5 mit **PALM** folgt in Kapitel 5. Darin wird anfangs ein weiterer Test für die nichtlineare Impulsadvektion vorgestellt. Auftretende Probleme, die durch WS5 in Bodennähe entstehen, sowie deren Lösung werden anschließend beschrieben. Danach wird der Einfluss von Diskretisierungsfehlern anhand von Simulationsergebnissen einer neutralen sowie konvektiven Grenzschicht demonstriert. Damit eingehend wird das Verhalten der Dissipationskontrolle in turbulenten Strömungen untersucht. Anschließend werden anhand einer LES-Vergleichsstudie Ergebnisse von Simulationen unter Verwendung von WS5 validiert und mit PW verglichen.

Das abschließende Kapitel 6 enthält eine Zusammenfassung und gibt einen Ausblick.

2 Large-Eddy Simulation

In diesem Kapitel werden zunächst einleitende Bemerkungen zur Beschreibung turbulenter Strömungen und deren numerische Simulation gegeben. Nachfolgend werden die in dieser Arbeit verwendeten physikalischen und numerischen Aspekte des **parallelisierten Large-Eddy-Simulations Modells PALM** vorgestellt. Im Anschluss daran wird auf die Parallelisierung des Modells sowie dessen Programmstruktur eingegangen.

2.1 Beschreibung turbulenter Strömungen

Turbulente Strömungen sind dreidimensionale stochastische Bewegungen des betreffenden Fluids, die instationär und rotationsbehaftet sind. Dadurch werden Impuls und skalare Größen räumlich ausgetauscht. Dieser, als turbulente Diffusion bezeichnete Prozess, ist um mehrere Größenordnungen größer als die molekulare Diffusion (Fröhlich, 2006). Die räumliche sowie zeitliche Skala der Turbulenz umfasst einen weiten Bereich. So besitzen die größten Wirbel in der atmosphärischen Grenzschicht Durchmesser in der Größenordnung von 10^3 m. Die kleinsten aktiven Wirbel besitzen Durchmesser von 10^{-3} m. Die zeitliche Skala der Wirbelstrukturen reicht von Bruchteilen von Sekunden bis Stunden (Stull, 1988).

Eine Maßzahl für die Turbulenz ist die dimensionslose Reynolds-Zahl :

$$Re = \frac{U L}{\nu}. \quad (2.1)$$

U und L sind typische Geschwindigkeits- und Längenskalen der betrachteten Strömung. ν steht mit den kleinsten dissipativen Wirbeln in Verbindung und wird als kinematische Viskosität des betreffenden Fluids bezeichnet. Die Reynolds-Zahl kann als das Verhältnis zwischen Trägheitskraft und Reibungskraft interpretiert werden (Stull, 1988). Strömungen werden turbulent, wenn eine kritische Reynolds-Zahl von etwa 10^3 überschritten wird (Fröhlich, 2006). Typische Reynolds-Zahlen für die atmosphärische Grenzschicht liegen in der Größenordnung von 10^8 , sodass die Strömung in der atmosphärischen Grenzschicht immer turbulent ist (Stull, 1988).

Die großen anisotropen Skalen enthalten den Großteil der turbulenten kinetischen Energie (TKE), wohingegen die kleinen isotropen Skalen nur einen geringen Anteil an der TKE einer Strömung ausmachen. In Abbildung 2.1 ist die spektrale Dichte der TKE S_{TKE} gegen die Wellenzahl κ logarithmisch aufgetragen. Im Bereich kleiner Wellenzahlen (großer Wellenlängen) wird TKE durch Scherung des Grundstromes und Auftrieb produziert. Dieser Bereich wird häufig als Produktionsbereich P bezeichnet. Im Inertialbereich I , häufig auch Trägheitsbereich genannt, zerfallen große Wirbel in immer kleinere. Dieser Energietransfer von großen zu kleinen Skalen wird

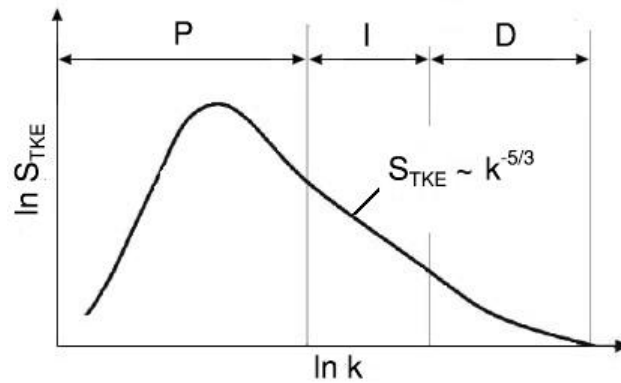


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der spektralen Dichte der TKE in Abhängigkeit von der Wellenzahl. P bezeichnet den Produktionsbereich, I den Inertial- oder auch Trägheitsbereich und D den Dissipationsbereich (nach Kraus, 2008).

auch Energiekaskade genannt und folgt im Inertialbereich der Beziehung:

$$S \propto \kappa^{-\frac{5}{3}}. \quad (2.2)$$

Der Energietransfer hängt im Inertialbereich nur von der Dissipation ab. Im Dissipationsbereich D zerfallen die Wirbel so lange in immer kleinere, bis ihre kinetische Energie durch molekulare Reibung vollständig in innere Energie (Wärme) umgewandelt ist. Ein typisches Maß für die Wirbelgröße im Dissipationsbereich ist die Kolmogorov-Länge

$$\eta \sim \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (2.3)$$

mit der Dissipationsrate ϵ und der kinematischen Viskosität ν . $\eta = 10^{-3} \text{ m}$ ist eine typische Größenordnung für die kleinsten aktiven Wirbel in der atmosphärischen Grenzschicht (Kraus, 2008).

Es existieren verschiedene Ansätze turbulente Strömungen zu simulieren. Zu den drei wesentlichen Ansätzen gehören (Breuer, 2006):

- **DNS:** Direkte Numerische Simulation,
- **RANS:** Reynolds-Averaged Navier-Stokes,
- **LES:** Large-Eddy Simulation.

Bei der DNS werden alle Turbulenzskalen explizit aufgelöst. Durch Einsatz geeigneter numerischer Verfahren und ausreichend feiner Gitter liefert die DNS praktisch exakte Ergebnisse. Da turbulente Strömungen dreidimensionale Phänomene sind, steigt die benötigte Gitterpunktanzahl mit $Re^{\frac{9}{4}}$ an (Breuer, 2006). Aus diesem Grund ist es bei der heutigen Rechenleistung nicht möglich eine DNS für die atmosphärische Grenzschicht durchzuführen.

Dem RANS-Ansatz liegt eine Reynolds-Mittelung der Navier-Stokes Gleichungen zugrunde, sodass nur die zeitliche Entwicklung des Ensemble-Mittels betrachtet wird. Infolge der Mittelung und der Nichtlinearität der Navier-Stokes Gleichungen treten Terme auf, die turbulente Größen enthalten (Etling, 2002). Diese Terme werden durch geeignete Parametrisierungen beschrieben. Der Speicherbedarf und die benötigte Rechenleistung von RANS-Modellen ist gering verglichen mit der DNS. Jedoch sind RANS-Modelle aufgrund der starken Abhängigkeiten von Parametrisierungen für eine detaillierte Simulation turbulenter Strömungen ungeeignet und kommen eher dort zum Einsatz, wo es um die Untersuchung mittlerer Größen geht (Fröhlich, 2006).

Die LES wird häufig als Mittelweg zwischen DNS und RANS bezeichnet, was sich zum einen auf das grundlegende Konzept der Skalentrennung und zum anderen auf die benötigte Rechenzeit bezieht. Bei der LES werden die größerskaligen energietragenden Wirbel explizit aufgelöst, wohingegen die kleinskaligen energiearmen Wirbel (Subskalen) modelliert werden. Subskalenmodelle hängen im Vergleich zu RANS-Modellen weniger stark von Parametrisierungen ab, da nur der Teil des Turbulenzspektrums kleiner einer Abschneidelänge $\bar{\Delta}$ modelliert werden muss, der aufgrund der universellen Eigenschaften der kleinen Skalen deutlich einfacher zu beschreiben ist. Dazu ist es notwendig, dass die kleinsten noch aufgelösten Wirbel im Inertialbereich liegen und universelle Eigenschaften aufweisen, damit die den Energietransfer bestimmende Dissipation durch das Subskalenmodell richtig modelliert werden kann. Aufgrund der Skalentrennung entfällt die Beschränkung auf kleine Re wie bei der DNS. Nichtsdestotrotz stellt die LES vergleichbar hohe Anforderungen an den Speicherbedarf und die Rechenleistung heutiger Großrechner wie die DNS (Breuer, 2006).

2.2 Grundgleichungen

Die Grundlage zur Beschreibung atmosphärischer Bewegungsvorgänge in einem rotierenden, kartesischen Koordinatensystem bilden die Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \epsilon_{ijk} f_j u_k - g \delta_{i3} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu_m \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (2.4)$$

der erste Hauptsatz der Thermodynamik

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -u_k \frac{\partial \theta}{\partial x_k} + \nu_h \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_k^2} + Q_\theta, \quad (2.5)$$

die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial (u_k \rho)}{\partial x_k} \quad (2.6)$$

sowie Erhaltungsgleichungen für aktive und passive Skalare

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -u_k \frac{\partial s}{\partial x_k} + \nu_s \frac{\partial^2 s}{\partial x_k^2} + Q_s. \quad (2.7)$$

Es gilt für die Indizes $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$. u_i steht für die drei Geschwindigkeitskomponenten u, v, w und x_i für die kartesischen Raumrichtungen x, y, z . ϵ_{ijk} ist der

2.2 Grundgleichungen

alternierende Einheitstensor, $f_i = (0, 2\Omega \cos(\varphi), 2\Omega \sin(\varphi))$ sind die Coriolisparameter mit der Winkelgeschwindigkeit Ω der Erde und der geographischen Breite φ . δ_{ij} ist das Kronecker-Symbol, g die Schwerebeschleunigung, ρ die Dichte, p der Druck, Θ die potentielle Temperatur, Q_h und Q_s sind Quell- bzw. Senkraten und ν_m, ν_h sowie ν_s die molekularen Diffusionskoeffizienten für Impuls, Wärme und Skalare.

Die thermodynamischen Zustandsvariablen Druck, Dichte und Temperatur stehen über die ideale Gasgleichung wie folgt in Verbindung:

$$p = \rho R T. \quad (2.8)$$

Θ ist mit der Lufttemperatur T und dem Druck p auf folgende Weise verknüpft:

$$\theta(z) = T(z) \left(\frac{1000 \text{ hPa}}{p(z)} \right)^{\frac{R}{c_p}}, \quad (2.9)$$

wobei R die spezifische Gaskonstante für Luft und c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck ist. Bei den Gleichungen (2.4)-(2.7) handelt es sich um partielle nichtlineare Differentialgleichungen, die im Allgemeinen nur auf numerischem Wege lösbar sind. Für die Vereinfachung der numerischen Lösungsverfahren, aber auch um Rechenzeit einzusparen, wird in **PALM** die Boussinesq-approximierte Form der Navier-Stokes Gleichungen verwendet. Dafür werden die thermodynamischen Zustandsvariablen in einen Grundzustand und eine Abweichung davon zerlegt:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_0(z) + \psi^*(x, y, z, t), \quad \text{mit } \psi \in \{p, \rho, T, \Theta\}. \quad (2.10)$$

Der Grundzustand soll sich nur mit der Höhe ändern sowie die ideale Gasgleichung

$$p_0 = \rho_0 R T_0 \quad (2.11)$$

und die hydrostatische Grundgleichung

$$\frac{\partial p_0(z)}{\partial z} = -g \rho_0(z) \quad (2.12)$$

erfüllen. Allerdings werden zeitlich konstante Druckgradienten

$$\frac{\partial p_0(z)}{\partial x} = f_3 \rho_0(z) v_g \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial p_0(z)}{\partial y} = -f_3 \rho_0(z) u_g, \quad (2.14)$$

als Antrieb für den Grundstrom zugelassen. Mit der differentiellen Form der Gasgleichung (2.8) und der Annahme, dass relative Druckschwankungen viel kleiner als relative Dichteschwankungen sind, wird die schwer messbare Dichte durch die potentielle Temperatur ersetzt. Werden die Annahmen (2.10)-(2.14) in die mit der Dichte multiplizierten Bewegungsgleichungen (2.4) eingesetzt, führt dies unter Vernachlässigung des molekularen Diffusionsterms und einigen Umformungen auf:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial (u_k u_i)}{\partial x_k} - \epsilon_{ijk} f_j u_k - \epsilon_{i3k} f_3 u_{k_g} + \frac{\theta^*}{\theta_0} g \delta_{i3} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2}. \quad (2.15)$$

Die Kontinuitätsgleichung (2.6) vereinfacht sich unter Zuhilfenahme von (2.10) zu:

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0. \quad (2.16)$$

Die Gleichungen (2.5) und (2.7) bleiben unverändert. Infolge der Inkompressibilität der Strömung treten keine Schallwellen mehr auf. Dadurch ist der erlaubte Zeitschritt nach dem Courant-Friedrichs-Lewy- (CFL-) Kriterium (2.46) um mehr als eine Größenordnung größer als bei einer kompressiblen Version der Navier-Stokes Gleichungen (2.4)-(2.7) (Uhlenbrock, 2006). Dichteunterschiede werden jedoch über den Auftriebsterm in Gleichung (2.15) berücksichtigt (Etling, 2002). Mit der Boussinesq-Approximation können Strömungen untersucht werden, bei denen Abweichungen vom hydrostatischen Grundzustand (2.12) nur gering ausfallen, wie zum Beispiel im Fall von flacher Konvektion (Dutton und Fichtl, 1969).

Der Einfluss von Feuchte und wolkenphysikalischen Prozessen kann mit **PALM** berücksichtigt werden. Dazu wird die potentielle Temperatur Θ in (2.5) und (2.15) durch die potentielle Flüssigwassertemperatur Θ_l ersetzt. Θ_l beschreibt die Temperatur, welche ein Luftpaket nach vollständiger Verdunstung des in ihm enthaltenen Flüssigwassers und feuchtadiabatischem Abstieg auf $p = 1000$ hPa annehmen würde. Der Zusammenhang mit der potentiellen Temperatur lässt sich wie folgt beschreiben:

$$\theta_l = \theta - \frac{l_v}{c_p} \left(\frac{\theta}{T} \right) q_l, \quad (2.17)$$

wobei l_v für die Verdunstungswärme und q_l für den Flüssigwassergehalt steht. Darüber hinaus wird eine weitere prognostische Gleichung (2.7) für den Gesamtwassergehalt q , bestehend aus spezifischer Feuchte q_v und Flüssigwassergehalt q_l , gelöst. Für die in (2.5) und (2.7) enthaltenen diabatischen Quell- und Senkterme Q_{θ_l} und Q_q werden Niederschlags- sowie Strahlungsprozesse bzw. nur Niederschlagsprozesse berücksichtigt. Letztere werden mit dem Kessler-Schema (Kessler, 1969) parametrisiert. Bei Abwesenheit diabatischer Prozesse reduzieren sich θ_l und q zu θ und q_v . Die potentielle virtuelle Temperatur lässt sich folgendermaßen darstellen (Schröter, 2003):

$$\theta_v = \left(\theta_l + \frac{l_v}{c_p} \left(\frac{\theta}{T} \right) q_l \right) (1 + 0.61 q - 1.61 q_l). \quad (2.18)$$

2.3 Filterung der Modellgleichungen

Die Lösung der Modellgleichungen mit LES erfordert eine Skalentrennung. Diese wird erreicht, indem auf die zu betrachtenden Variablen ψ eine räumliche Filteroperation angewendet wird. Mathematisch ist die Filteroperation eine Faltung von ψ mit einer Filterfunktion G :

$$\bar{\psi}(x_i) = \int_V dx'_i G(x_i - x'_i) \psi(x'_i). \quad (2.19)$$

Wird für die Filterfunktion ein Top-Hat Filter mit einer Filterweite gleich der Gitterweite verwendet, führt dies direkt auf die in **PALM** verwendete Kontrollvolumenmethode nach Schumann (1975). Die entsprechende Filteroperation

$$\bar{\psi}(V, t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_V dV' \psi(V', t) \quad (2.20)$$

mit dem Volumen einer Gitterbox

$$V = \left[x - \frac{\Delta x}{2}, x + \frac{\Delta x}{2} \right] \times \left[y - \frac{\Delta y}{2}, y + \frac{\Delta y}{2} \right] \times \left[z - \frac{\Delta z}{2}, z + \frac{\Delta z}{2} \right] \quad (2.21)$$

verhält sich dabei wie ein Reynolds-Operator mit den folgenden Eigenschaften:

$$\bar{\bar{\psi}} = \bar{\psi}, \quad \bar{\psi \phi} = \bar{\psi} \bar{\phi} + \overline{\psi'' \phi''}, \quad \overline{\psi''} = 0. \quad (2.22)$$

Für die nicht aufgelöste Feinstruktur ψ'' ergibt sich:

$$\psi''(x_i, t) = \psi(x_i, t) - \bar{\psi}(x_i, t). \quad (2.23)$$

Numerische Diskretisierung und Filterung sind direkt miteinander verbunden, was häufig auch als *implizite Filterung* bezeichnet wird (Breuer, 2006). Durch Anwendung der räumlichen Filteroperation auf die Boussinesq-approximierten Gleichungen, unter Vernachlässigung der molekularen Diffusionsterme, ergibt sich das in **PALM** verwendete Gleichungssystem:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_k \bar{u}_i)}{\partial x_k} - \epsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k - \epsilon_{i3k} f_3 u_{k_g} + \frac{\bar{\theta}_l^*}{\theta_{l,0}} g \delta_{i3} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ki}}{\partial x_k}, \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}_l}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_k \bar{\theta}_l)}{\partial x_k} - \frac{\partial H_k}{\partial x_k} + Q_\theta, \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_k \bar{q})}{\partial x_k} - \frac{\partial W_k}{\partial x_k} + Q_q, \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} = 0. \quad (2.27)$$

Die Größen

$$\tau_{ki} = \overline{u_k u_i} - \bar{u}_k \bar{u}_i, \quad H_k = \overline{u_k \Theta_l} - \bar{u}_k \bar{\Theta}_l, \quad W_k = \overline{u_k q} - \bar{u}_k \bar{q}, \quad (2.28)$$

stehen für die subskaligen Flüsse von Impuls, potentieller Flüssigwassertemperatur und totalen Wassergehalt. Die Lösung eines Strömungsproblems wird nicht nur allein durch die hier beschriebene Filteroperation beeinflusst, sondern auch durch die numerische Diskretisierung und das im folgenden Abschnitt beschriebene Subskalenmodell (Sengupta und Nair, 1999). Eine genauerer Überblick dazu ist in Abschnitt 3.3 zu finden.

2.4 Subskalenmodell

Das Gleichungssystem (2.24)-(2.27) enthält mehr Unbekannte als Gleichungen und ist somit nicht geschlossen. Die Schließung des Gleichungssystems erfordert die Parametrisierung der subskaligen Flüsse. Dabei soll die Parametrisierung das richtige Maß

an Dissipation bereitstellen um Energie von den großen zu den kleinen Skalen gemäß der Energiekaskade zu transferieren (Fröhlich, 2006). In **PALM** wird ein auf dem Smagorinsky-Modell (Smagorinsky, 1963) basierender Schließungsansatz nach Deardorff (1980) verwendet. Die subskaligen Flüsse werden über einen Gradientansatz mit den aufgelösten Größen verknüpft:

$$\tau_{ki} = -K_m \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \right), \quad (2.29)$$

$$H_k = -K_h \frac{\partial \bar{\theta}_l}{\partial x_k}, \quad (2.30)$$

$$W_k = -K_h \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_k}. \quad (2.31)$$

Die turbulenten Diffusionskoeffizienten für Impuls K_m und Wärme K_h sind über die subskalige turbulente kinetische Energie e und die gitterweiten- und schichtungsabhängige Mischungsweglänge

$$l = \begin{cases} \min \left(\Delta, 0.7 d, 0.76 \sqrt{e} \left(\frac{g}{\theta_{l,0}} \frac{\partial \bar{\theta}_l}{\partial z} \right)^{-\frac{1}{2}} \right) & \text{für } \frac{\partial \bar{\theta}_l}{\partial z} > 0 \\ \min (\Delta, 0.7 d) & \text{für } \frac{\partial \bar{\theta}_l}{\partial z} \leq 0 \end{cases} \quad (2.32)$$

folgendermaßen parametrisiert:

$$K_m = c_m l \sqrt{e}, \quad (2.33)$$

$$K_h = \left(1 + \frac{2l}{\Delta} \right) K_m. \quad (2.34)$$

Dabei ist d der Abstand zum Boden, $c_m = 0.1$ die Smagorinsky-Konstante und $\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z}$ die charakteristische Gitterweite. Die subskalige turbulente kinetische Energie wird über eine prognostische Gleichung

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_k e)}{\partial x_k} - \tau_{ki} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} + \frac{g}{\theta_v} H_{v,3} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \overline{u_k'' \left(e + \frac{p''}{\rho_0} \right)} \right\} - \epsilon \quad (2.35)$$

bestimmt¹. Die Schließung von (2.35) erfordert eine Parametrisierung des Dissipationssterms

$$\epsilon = \left(0.19 + 0.74 \frac{l}{\Delta} \right) \frac{e^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (2.36)$$

sowie der turbulenten Flüsse von subskaliger Turbulenzenergie und Druckschwankungen

$$\overline{u_k'' \left(e + \frac{p''}{\rho_0} \right)} = -2 K_m \frac{\partial e}{\partial x_k}. \quad (2.37)$$

$H_{v,3}$ bezeichnet den vertikalen subskaligen Fluss der potentiellen virtuellen Temperatur. Damit ist das gefilterte Gleichungssystem geschlossen. Eine starke analytische

¹Informationen zu den einzelnen Termen sind in Etling (2002) zu finden.

Abhängigkeit aufgrund der vorgenommenen Parametrisierungen im Subskalenmodell ist nur dort gegeben wo wenig aufgelöste Strukturen vorhanden sind, zum Beispiel in der Nähe fester Berandungen (Uhlenbrock, 2006). Der Einfluss der subskaligen Flüsse nimmt mit kleiner werdender Filterlänge ab, sodass diese möglichst gering gewählt werden sollte um den Einfluss des Subskalenmodells zu minimieren.

Von hier an werden aufgelöste Anteile mit ψ bezeichnet. $\bar{\psi}$ steht ab hier für ein zeitliches oder räumliches Reynolds-Mittel. Subskalige Anteile werden weiterhin mit ψ'' gekennzeichnet.

2.5 Diskretisierung und numerische Lösung der Modellgleichungen

Um das Gleichungssystem auf numerischem Wege lösen zu können, werden Differentialoperatoren in finite Differenzen überführt. Dadurch sind die Variablen nur noch für diskrete Punkte in Raum und Zeit definiert. Die in **PALM** verwendeten räumlichen und zeitlichen Diskretisierungen werden im Folgenden Abschnitt beschrieben.

2.5.1 Diskretisierung im Raum

Die Variablen sind auf dem in Abbildung 2.2 dargestellten Arakawa-C Gitter definiert. Skalare Größen sind im Mittelpunkt einer Gitterbox definiert, horizontale und vertikale Geschwindigkeitskomponenten hingegen um eine halbe Gitterweite in entsprechend negative bzw. positive Raumrichtung versetzt an den Rändern der jeweiligen Gitterbox. Räumliche Ableitungen von Geschwindigkeitskomponenten können somit ohne zusätzliche Interpolationen auf den Gittermittelpunkt zentriert werden. Gleiches gilt in umgekehrter Richtung auch für skalare Variablen. Dadurch wird nach Pielke (2002) die effektive Auflösung der betreffenden Variablen verdoppelt, was besonders bei der Druck-Geschwindigkeits Kopplung von großer Bedeutung ist. Die horizontalen Gitterweiten Δx und Δy sind im gesamten Modellgebiet äquidistant. In **PALM** besteht die Möglichkeit das vertikale Gitter ab einer vorgegebenen Höhe zu strecken

$$\Delta z_{k+1} = \begin{cases} \Delta z_k, & k \leq k_{\text{stretch}} \\ f_{\text{stretch}} \Delta z_k, & k > k_{\text{stretch}} \end{cases} \quad (2.38)$$

um die Obergrenze des Modellgebiets ohne zusätzlichen Rechenaufwand zu erhöhen.

Die Advektionsterme in (2.24)-(2.26) sowie (2.35) werden standardmäßig mit dem Piacsek-Williams Verfahren (PW) (Piacsek und Williams, 1970) in der schiefssymmetrischen Form C3 diskretisiert:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial(u\psi)}{\partial x} + u \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) = \frac{u_{i+\frac{1}{2}} \psi_{i+1} - u_{i-\frac{1}{2}} \psi_{i-1}}{2\Delta x}. \quad (2.39)$$

$u_{i\pm\frac{1}{2}}$ bezeichnen die um $\pm\Delta x$ versetzten Geschwindigkeitskomponenten in Bezug auf ψ_i . Ist ψ_i eine Geschwindigkeitskomponente, wird die advehierende Komponente so

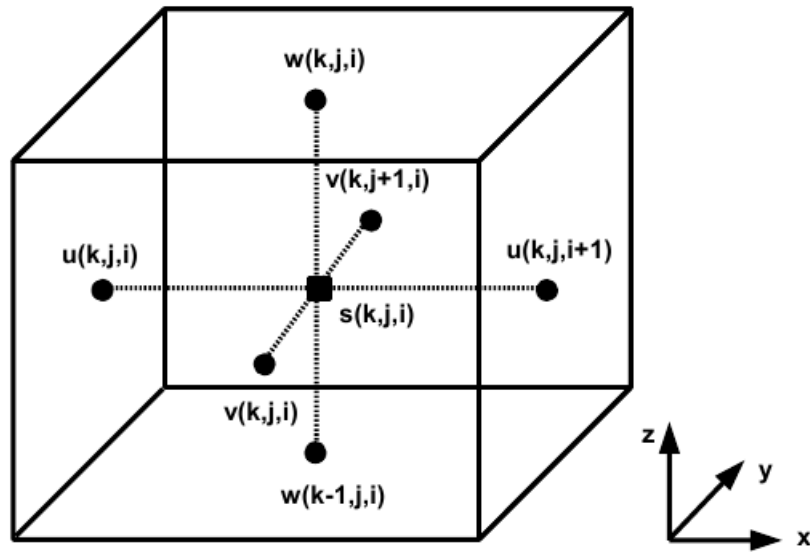


Abbildung 2.2: Anordnung der Variablen im Arakawa-C Gitter. Die Indizes i, j, k stehen für die Raumrichtungen x, y, z .

interpoliert, dass sie bezogen auf die zu advehierte Komponente um eine halbe Gitterweite versetzt ist. PW ist ein zentriertes finites Differenzenverfahren zweiter Ordnung. Das Volumenintegral über das Quadrat einer advehierten Größe bleibt in der Form C3 erhalten. Besonders bei der Impulsadvektion ist dies von Vorteil, da dann die Diskretisierung keine Senke für die TKE ist (Glendening und Haack, 2001). Die advehierte Größe selber ist jedoch keine Erhaltungsgröße in der Form C3, wodurch sich das Volumenintegral über die Größe proportional zur Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes² verringert. Infolgedessen wird für die skalare Advektion eine leicht modifizierte Form von C3 verwendet:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial (u \psi)}{\partial x} + u \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{u_{i+\frac{1}{2}} \psi_{i+1} - u_{i-\frac{1}{2}} \psi_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{\psi_i (u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}})}{2\Delta x}. \quad (2.40)$$

Eine genauere Analyse der Eigenschaften von PW findet sich in Abschnitt 3.2.1. Für die Advektion von Impuls und Skalaren stehen noch das Upstream-Verfahren erster Ordnung und das Upstream-Spline Verfahren (Price und MacPherson, 1973) zur Verfügung. Das Upstream-Verfahren weist eine starke numerische Diffusion auf und ist somit nur bedingt für Simulationen turbulenter Strömungen geeignet. Aufgrund globaler Datenabhängigkeiten entsteht ein hoher Kommunikationsaufwand zwischen den Prozessoren, wodurch das Upstream-Spline Verfahren aus ökonomischen Gründen kaum Verwendung findet. Für die skalare Advektion kann noch das sehr rechenintensive Flusskorrektur-Verfahren von Bott und Chlond (1994) benutzt werden. Numerische Fehler bei der Diskretisierung der Advektionsterme können durch eine Galilei-Transformation reduziert werden. Das Koordinatensystem wird dann wahlweise mit der mittleren horizontalen Strömungsgeschwindigkeit oder mit dem geostrophischen Wind in die entsprechende Richtung verlagert.

²Aufgrund numerischer Fehler ist die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes nicht exakt 0.

2.5.2 Diskretisierung in der Zeit

Für die zeitliche Integration der prognostischen Gleichungen wird ein Runge-Kutta Verfahren verwendet. Eine gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{d\psi}{dt} = f(t, \psi) \quad (2.41)$$

lässt sich mit Hilfe eines expliziten N-stufigen Runge-Kutta Verfahrens zwischen t^n und $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ wie folgt integrieren:

$$\psi^{(0)} = \psi^n, \quad (2.42)$$

$$k^i = f(t^n + \Delta t \alpha_i, \psi^{i-1}), \quad (2.43)$$

$$\psi^i = \psi^n + \Delta t \sum_{j=1}^i \beta_{i+1,j} k^j, \quad \text{mit } i \in [1, 2, \dots, N] \quad (2.44)$$

$$\psi^{n+1} = \psi^N. \quad (2.45)$$

Die Koeffizienten können folgendermaßen in einem Butcher-Tableau (Butcher, 1987) dargestellt werden:

α_1	$\beta_{1,1}$	0		
α_2	$\beta_{2,1}$	$\beta_{2,2}$	0	
...	...		0	
α_N	$\beta_{N,1}$...	$\beta_{N,N-1}$	0
	$\beta_{N+1,1}$...	$\beta_{N+1,N-1}$	$\beta_{N+1,N}$

In **PALM** wird ein drei-stufiges Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung (RK3^{PALM}) von Williamson (1979) benutzt. Die zugehörigen Koeffizienten lauten:

0	0	0	0
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{-3}{16}$	$\frac{1}{2}$	0
	$\frac{1}{6}$	$\frac{3}{10}$	$\frac{8}{15}$

Anschaulich betrachtet werden dazu Tendenzterme an drei verschiedenen Stellen des Zeitintervalls berechnet und anschließend gewichtet gemittelt. Eine genauere Analyse der numerischen Eigenschaften des RK3^{PALM} ist in Abschnitt 3.2.1 zu finden.

Des Weiteren stehen noch das auf zwei Zeitebenen basierende Leap-Frog Verfahren, ein Runge-Kutta Verfahren zweiter Ordnung sowie das Eulerverfahren zur Verfügung.

Der Zeitschritt Δt unterliegt Stabilitätsbeschränkungen. Zum einen muss das CFL-Kriterium (Courant et al., 1928)

$$\Delta t_{\text{CFL}} \leq \min \left(\frac{\Delta x_i}{\bar{u}_{i_{\max}}} \right) \quad (2.46)$$

und zum anderen das Diffusionskriterium (Roache, 1985)

$$\Delta t_{\text{Diff}} \leq \min \left(\frac{\Delta x_i^2}{\max(K_m, K_h)} \right) \quad (2.47)$$

erfüllt sein, sodass sich

$$\Delta t \leq f_{\text{dt}} \min(\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{Diff}}) \quad (2.48)$$

ergibt. Der Faktor f_{dt} ist ein Sicherheitsfaktor kleiner eins und ist für RK3^{PALM} standardmäßig auf 0.9 gesetzt.

Die Divergenzfreiheit der Strömung wird für jeden Runge-Kutta Teilschritt über eine Prädiktor-Korrektor Methode nach Patrinos und Kistler (1977) realisiert. Da der Stördruck p^* in der Bewegungsgleichung (2.24) eine rein dynamische Variable ist, besteht keinerlei Kopplung über die Zustandsgleichung (2.8) mit dem ersten Hauptsatz (2.25). Damit kann der Stördruckterm mehr als eine mathematische Hilfsvariable, als eine physikalische Größe angesehen werden (Ferziger, 1999). Gleichung (2.24) wird zunächst unter Vernachlässigung des Druckterms gelöst. Das resultierende provisorische Geschwindigkeitsfeld $u_{i,\text{prov.}}^{t+\Delta t}$ erfüllt im Allgemeinen nicht die Bedingung der Divergenzfreiheit (2.27). Der Stördruckterm wird als eine Art Quellterm in der Bewegungsgleichung (2.24) betrachtet, der so bestimmt wird, dass $u_i^{t+\Delta t}$ die Kontinuitätsgleichung (2.27) erfüllt. Dafür wird das endgültige Geschwindigkeitsfeld zerlegt

$$u_i^{t+\Delta t} = u_{i,\text{prov.}}^{t+\Delta t} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p^{*t}}{\partial x_i} \quad (2.49)$$

und in die Kontinuitätsgleichung (2.27) eingesetzt. Die sich daraus ergebende Poisson-Gleichung

$$\frac{\partial^2 p^{*t}}{\partial x_i^2} = \frac{\rho_0}{\Delta t} \frac{\partial u_{i,\text{prov.}}^{t+\Delta t}}{\partial x_i} \quad (2.50)$$

wird mit einem direkten Verfahren von Schumann und Sweet (1988) gelöst. Für den Fall zyklischer Randbedingungen wird die Poisson-Gleichung in beiden horizontalen Raumrichtungen Fourier-transformiert³. Das daraus entstehende tridiagonale Gleichungssystem wird für den transformierten Stördruck gelöst, welcher anschließend wieder zurück in den Ortsraum transformiert wird (Raasch und Schröter, 2001). Des Weiteren stehen noch das SOR-Verfahren, oder im Falle nichtzyklischer seitlicher Randbedingungen ein Multigrid-Verfahren für die Lösung der Poisson-Gleichung zur Verfügung.

2.6 Rand- und Anfangsbedingungen

Das Modellgebiet ist in seinen räumlichen Abmessungen begrenzt. Dazu müssen an den Modellgebietsgrenzen entsprechende Randbedingungen (RB) gesetzt werden.

³Die Fourier-Transformation wird durch einen Fast-Fourier-Algorithmus (FFT) realisiert.

Diese unterscheiden sich in:

- Dirichlet-RB

$$\psi(\partial\Omega) = \Phi, \quad (2.51)$$

bei denen ein fester Wert am entsprechenden Rand vorgegeben wird,

- Neumann-RB

$$\partial_n \psi(\partial\Omega) = \Phi, \quad (2.52)$$

bei denen die Ableitung normal zum Rand vorgegeben wird, sowie

- zyklische RB

$$\psi(-1) = \psi(N_{x_i}), \quad \psi(N_{x_i} + 1) = \psi(0) \quad (2.53)$$

für die seitlichen Ränder, die eine periodische Fortsetzung des Strömungsgebiets darstellen.

$\partial\Omega$ bezeichnet die Menge aller Randelemente des Modellgebiets, Φ den jeweiligen Wert, ∂_n die Ableitung normal zum Rand, und N_{x_i} die Anzahl der Gitterpunkte in die entsprechende Raumrichtung. Für die seitlichen Ein- und Ausströmränder können weiterhin noch Dirichlet- und Strahlungsrandbedingungen vorgegeben werden, auf die nachfolgend jedoch nicht weiter eingegangen wird. Am Ober- und Unterrand des Modellgebiets können für horizontale Geschwindigkeitskomponenten und skalare Größen Dirichlet- oder Neumann-RB gewählt werden. Eine Ausnahme bildet die TKE, welche am Oberrand immer die Neumann-RB ($\partial_z e = 0$) erfüllen muss. Die Vertikalgeschwindigkeit verschwindet sowohl am Ober- als auch am Unterrand des Modellgebiets. Am unteren Rand gilt für die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten die Haftreibungsbedingung⁴ $u_i(z = 0\text{m}) = 0 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Aufgrund der in Abbildung 2.2 dargestellten Schachtelung des Gitters sind horizontale Geschwindigkeitskomponenten und skalare Größen nicht direkt an der Oberfläche ($z = 0\text{m}$), sondern um jeweils $\pm \frac{\Delta z}{2}$ versetzt definiert. Die Haftreibungsbedingung wird durch Spiegelung der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten ($\frac{\Delta z}{2}$) an der Ebene $z = 0\text{m}$ realisiert:

$$u_i(x_i, -\frac{\Delta z}{2}) = -u_i(x_i, +\frac{\Delta z}{2}), \quad \text{mit } i \in (1, 2). \quad (2.54)$$

Zwischen Erdboden und erstem Gitterlevel ($z_p = \frac{\Delta z}{2}\text{m}$) wird eine Prandtl-Schicht angenommen. Die subskaligen vertikalen Impulsflüsse $\overline{w''u''}$, $\overline{w''v''}$ werden in diesem Bereich mit der Monin-Obukhovschen Ähnlichkeitstheorie (Monin und Obukhov, 1954) beschrieben. An der Oberfläche können für die skalaren Größen Θ_l und q direkte Werte oder die dazugehörigen vertikalen Oberflächenflüsse vorgegeben werden

⁴Eine Ausnahme bilden hier die Advektionstests für die Skalar- und Impulsadvektion mit **PALM**, bei denen sowohl am unteren als auch am oberen Rand Gleitreibungsbedingungen vorgegeben werden.

(Letzel, 2007). Im ersten Fall ist die Parametrisierung der subskaligen Flüsse gemäß der Ähnlichkeitstheorie erforderlich. Eine genauere Beschreibung dazu ist in (Schröter, 2003), (Uhlenbrock, 2006) und (Letzel, 2007) zu finden.

Es bestehen mehrere Möglichkeiten die Anfangszustände der dreidimensionalen prognostischen Felder festzulegen. Vertikalprofile des geostrophischen Windes, der potentiellen Flüssigwassertemperatur sowie des Gesamtwassergehaltes können vorgegeben oder prognostisch durch einen eindimensionalen Vorlauf berechnet werden. Dabei wird eine eindimensionale Version der Modellgleichungen mit zeitlich konstanten Temperatur- und Feuchteprofilen so lange zeitlich integriert, bis sich die Geschwindigkeitskomponenten im geostrophischen Gleichgewicht befinden. Da nach Übergabe der eindimensionalen Profile die dreidimensionalen Variablen zu Anfang horizontal homogen verteilt sind, werden räumlich unkorrelierte Zufallsstörungen auf die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten aufgeprägt, bis die TKE einen Schwellwert überschreitet (Schröter, 2003).

2.7 Parallelisierung

Die Idee der Parallelisierung besteht darin, den gesamten anfallenden Rechenaufwand auf mehrere Prozessorelemente (PE) aufzuteilen, um somit die Bearbeitungszeit des zu lösenden Problems zu verringern (Schröter, 2003). **PALM** ist unter Benutzung von MPI (Message-Passing-Interface) (Gropp, 1999) für Massiv-Parallelrechner mit verteiltem Speicher (*distributed memory*) parallelisiert. MPI ist eine Bibliothek von vordefinierten Funktionen für die Kommunikation in parallelen Systemen, mit deren Hilfe der Datenaustausch zwischen PEs durchgeführt wird. Die Parallelisierung des Modells ist durch eine zweidimensionale horizontale Gebietszerlegung realisiert. Jedem PE ist ein Teilgebiet zugeordnet, auf dem der vollständigen Satz an Modellgleichungen gelöst wird. Bei der Initialisierung des Modells wird eine virtuelle Prozessortopologie erzeugt, wie sie schematisch in Abbildung 2.3 dargestellt ist. Diese in einem Kommunikator gespeicherte Zuordnung, ermöglicht eine direkte Kommunikation zwischen den Prozessoren, die aufgrund lokaler Datenabhängigkeiten an den Rändern der Teilgebiete durch Finite-Differenzen-Approximationen notwendig ist. Zusätzliche Geisterränder an den seitlichen Rändern der Teilgebiete speichern Daten benachbarter PEs und werden nach jedem RK3^{PALM} Teilschritt ausgetauscht, wodurch ein erheblicher Kommunikationsaufwand entsteht. Eine tiefergehende Beschreibung bezüglich des Geisterandaustauschs wird in Abschnitt 4.1 gegeben. Im Fall von Systemen mit gemeinsamem Speicher (*shared memory*) kann zusätzlich OpenMP⁵ genutzt werden. Weitere Informationen zur Parallelisierung von **PALM** sind in (Raasch und Schröter, 2001) und (Schröter, 2003) zu finden.

⁵Nähere Informationen auf www.openMP.org

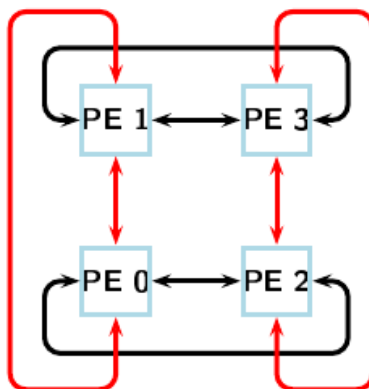


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung einer virtuellen Prozessortopologie bei zweidimensionaler Gebietszerlegung mit 2 x 2 PEs (nach Schröter, 2003). Die Pfeile kennzeichnen die Richtung des Geisterrandaustauschs zwischen den PEs nach jedem $RK3^{\text{PALM}}$ Teilschritt.

2.8 Programmstruktur

An dieser Stelle wird ein kurzer Abriss der grundsätzlichen Programmstruktur gegeben. Eine genauere Beschreibung der im Rahmen dieser Arbeit modifizierten Unterprogramme folgt an entsprechender Stelle.

PALM ist in Fortran90 geschrieben und modular programmiert. Dadurch ist der Quellcode auf mehrere Dateien verteilt und somit leicht lesbar. Zusätzliche Softwarepakete wie DVRP oder NetCDF, maschinenabhängige Segmente oder auch die Parallelisierung mit MPI bzw. OpenMP werden mit Hilfe von Präprozessor-Direktiven gesteuert. Die Eingabe verschiedener Steuerungsparameter ist durch Fortran-Namelists realisiert. Diese befinden sich in einer Parameterdatei und werden nach Programmstart durch das Unterprogramm `parin` eingelesen. Anschließend werden im Modul `init_pegrid` die Gebietsgrenzen der Teilgebiete, die Prozessortopologie sowie für den Datenaustausch relevante MPI-Datentypen initialisiert. Nachfolgend werden in `init_grid` gitterabhängige Variablen allokiert und berechnet. Eine Kontrolle und Interpretation der Eingabeparameter sowie das Setzen von Steuerungsanweisungen findet in `check_parameters` statt. Danach werden in `init_3d_modell` prognostische und diagnostische Felder allokiert und initialisiert, entweder durch Einlesen eines Datensatzes (*Restart-Daten*), einen eindimensionalen Vorlauf, oder Übergabe vorgegebener Vertikalprofile. Im Anschluss daran wird `time_integrations` aufgerufen. Dieses Unterprogramm ist der Kern des Modells und steuert die zeitliche Integration der Modellgleichungen, die statistische Auswertung sowie die Datenausgabe. Darin wird am Anfang jedes Integrationsschrittes gemäß (2.48) der Zeitschritt bestimmt. Die eigentliche zeitliche Integration der Modellgleichungen erfolgt für jeden $RK3^{\text{PALM}}$ Teilschritt im Modul `prognostic_equations`. Darin sind drei, für verschiedene Rechnerarchitekturen optimierte Versionen enthalten. Für Vektorprozessoren wird `prognostic_equations_vector` verwendet. Dort steht jeder Tendenz-

term in einer gesonderten Schleife. Im Gegensatz dazu stehen alle Tendenzterme in `prognostic_equations_cache` in einer Schleife. Diese Version ist für Rechnerarchitekturen mit mehreren Caches (Zwischenspeicher) optimiert. Eine Mischung aus beiden vorhergehenden Versionen stellt `prognostic_equations_noopt` dar, wo jede prognostische Modellgleichung in einer gesonderten Schleife steht. Die Unterprogramme für die Tendenzterme, welche in `prognostic_equations` aufgerufen werden, sind je nach verwendeter Rechnerarchitektur in einer Cache- oder einer Vektor-optimierten Version verfügbar. Nach jedem RK3^{PALM} Teilschritt werden in `exchange_horiz` die Geosterränder ausgetauscht und zyklische RB gesetzt. Die verbleibenden Ränder werden danach in `boundary_cond` behandelt. Abhängig vom RK3^{PALM} Teilschritt werden bei Bedarf Zufallsstörungen in `disturb_field` auf die Geschwindigkeitskomponenten aufgeprägt. In `pres` wird die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes berechnet, die Poisson-Gleichung durch Aufruf des Drucklösers gelöst und das endgültige Geschwindigkeitsfeld berechnet. Die Berechnung von diagnostischen Zusammenhängen, bodennahen subskaligen Flüssen sowie von Diffusionskoeffizienten steuert `time_integrations` durch Aufruf entsprechender Routinen. Die statistische Auswertung und zeitliche Mittelung erfolgt in Unterprogrammen wie `flow_statistics`, `sum_up_3d_data` oder `calc_spectra`. Bevor `time_integrations` wieder mit der Berechnung des Zeitschrittes beginnt, werden in Abhängigkeit vom zeitlichen Mittelungsintervall Routinen für die Datenausgabe aufgerufen. Sind Fortsetzungssimulationen geplant, werden alle notwendigen Variablen am Ende einer Simulation durch `write_3d_binary` binär in Dateien geschrieben. Abschließend werden alle CPU Zeitmessungen, die während der Simulation getätigt wurden, durch `cpu_statistics` aufaddiert und ausgegeben.

Über Schnittstellen⁶ kann der Benutzer eigenen Quellcode hinzufügen.

⁶Nähere Informationen dazu: <http://palm.muk.uni-hannover.de/wiki/doc/app/userint>

3 Advektionsverfahren höherer Ordnung

Zu Beginn des Kapitels werden verschiedene Finite-Differenzen Approximationen¹ zur Diskretisierung des Advektionsterms und deren generelle Eigenschaften vorgestellt. Danach folgt eine Beschreibung des Verfahrens fünfter Ordnung von Wicker und Skamarock (2002) (WS5). Eine Analyse der numerischen Eigenschaften sowie Ergebnisse idealisierter Advektionstests folgen im Anschluss. Einflüsse numerischer Diffusion auf LES und Möglichkeiten zur Kontrolle dieser werden am Ende des Kapitels diskutiert.

3.1 Eigenschaften verschiedener Advektionsverfahren

Das Ziel numerischer Simulationen ist die Realität möglichst genau zu beschreiben. Bei der numerischen Approximation entstehen jedoch Fehler, die das Simulationsergebnis maßgeblich beeinflussen. Die numerische Lösung der hier eindimensional dargestellten Advektionsgleichung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -u \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (3.1)$$

beruht auf einer zeitlichen und räumlichen Diskretisierung. Für die zeitliche Integration sind Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung (Abschnitt 2.5.2) ein Kompromiss zwischen Genauigkeit, Stabilitätseigenschaften und Rechenaufwand. Für die Diskretisierung des Advektionsterms existieren eine Vielzahl von Verfahren, die sich in Genauigkeit, Stabilität und Rechenaufwand unterscheiden.

Die Herleitung Finiter-Differenzen Approximationen beruht auf Linearkombination endlicher Taylorreihenentwicklungen

$$\psi(x + n\Delta x) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} \left(\frac{\partial^k \psi(x)}{\partial x^k} (n\Delta x)^k \right) + O((\Delta x)^{n+1}), \quad (3.2)$$

die anschließend nach $\partial \psi(x)/\partial x$ umgestellt werden. Die nicht berücksichtigten Terme der Taylorreihen werden als Abbruchfehler oder Diskretisierungsfehler und die darin auftretende niedrigste Potenz in Δx als Genauigkeit oder Ordnung der Finiten-Differenzen Approximation bezeichnet. Abbruchterme mit geraden Ableitungen (Dissipationsterme) sind für Dissipationsfehler verantwortlich. Diese werden häufig auch als numerische Diffusion bzw. Dissipation bezeichnet und führen zu einer Abschwächung von Gradienten und zu einer Glättung der advehierten Funktion (Amplituden-

¹In dieser Arbeit werden ausschließlich Finite-Differenzen Approximationen verwendet. Auf die Vielzahl alternativer Diskretisierungen wie zum Beispiel Finite-Elemente, spektrale Verfahren oder Verfahren die auf einer Lagrangeschen Formulierung der Strömung basieren, wird nicht eingegangen.

dämpfung). Terme mit ungeraden Ableitungen sind für Dispersionsfehler verantwortlich, die Phasenverschiebungen und Oszillationen (Wiggles) in der Nähe großer Gradienten verursachen. Fourieranalysen zeigen eine starke Abhängigkeit der Dissipations- und Dispersionsfehler von der Wellenzahl $\kappa = \frac{2\pi}{\lambda}$, wobei Moden mit großer Wellenzahl deutlich anfälliger für numerische Fehler sind als Moden mit kleineren Wellenzahlen. Räumlich zentrierte Differenzen besitzen keine geraden Ableitungen im Abbruchfehler und sind daher frei von numerischer Diffusion. Diese Eigenschaft zentrierter Verfahren ist jedoch häufig ein Nachteil, da sich entstehende Oszillationen ungehindert ausbreiten und die eigentliche Lösung überlagern können. Eine Alternative besteht in der Verwendung von Verfahren mit numerischer Diffusion, welche kleine Skalen wie ein Tiefpassfilter dämpft. Dazu gehören zum einen nichtzentrierte Aufwindverfahren (*engl.* upwind schemes), die jedoch den Nachteil haben, dass die Wahl der in die Berechnung eingehenden Gitterpunkte von der Ausbreitungsrichtung der Moden abhängt. Diese muss zu jedem Zeitschritt bekannt sein, damit die transportierte Information entlang der Charakteristiken erhalten werden kann und es nicht zu numerischen Instabilitäten kommt. Eine zweite Möglichkeit ist einen Dissipationsterm explizit zu einem zentrierten Verfahren hinzuzufügen, um somit eine dynamische Anpassung der in die Berechnung eingehenden Gitterpunkte zu erreichen (Durrán, 1999).

Verfahren höherer Ordnung weisen geringere Abbruchfehler auf. Dies äußert sich vor allem in der Wellenzahlabhängigkeit der Dispersions- und Dissipationsfehler, welche mit zunehmender Ordnung erst bei immer größeren Wellenzahlen signifikant wird, wie in Abschnitt 3.2.1 noch gezeigt wird.

Ein Advektionsschema heißt monoton, wenn es keine neuen Extrema produziert bzw. vorhandene weiter verstärkt. Diese Eigenschaft garantiert bei der Advektion positiv definiter Skalare auch die positive Definitheit während des gesamten Transportprozesses (Bott, 1989). Alle linearen² monotonen Verfahren sind erster Ordnung. Monotone Schemen höherer Ordnung werden durch Wichtung von numerischen Flüssen höherer Ordnung und monotoner Flüsse erster Ordnung so kombiniert, dass eine möglichst hohe numerische Auflösung erreicht wird, ohne dabei Oszillationen zu produzieren. Dazu werden Flusskorrektur-Verfahren oder Fluss-Limiter eingesetzt. Flusskorrektur-Verfahren erfordern die vorläufige monotone Lösung zur Zeit $t + \Delta t$. Diese wird anschließend zur Normierung der hochauflösenden Flüsse zur Zeit t verwendet, mit denen dann die endgültige monotone Lösung zur Zeit $t + \Delta t$ ermittelt wird. Fluss-Limiter sind analytische Funktionen, die auf der Glattheit der Daten basieren und die Flüsse entsprechend wichten. Monotone Verfahren höherer Ordnung sind im Allgemeinen sehr rechenintensiv und oftmals nur für die skalare Advektion konstruiert. Weiterführende Informationen zu monotonen Schemen sind in Durrán (1999) zu finden.

Advektionsschemen können in explizite und kompakte Schemen unterteilt werden. Bei expliziten Verfahren wird die Ableitung nur mit bekannten umliegenden Werten berechnet, wohingegen bei kompakten Schemen zusätzlich noch umliegende Ableitungen mit in die Berechnung eingehen (Sengupta und Nair, 1999). Kompakte Schemen benötigen bei gleicher Ordnung weniger Gitterpunkte als explizite und haben im Allge-

²Alle Advektionsverfahren, die aus einer Linearkombination von Taylorreihen resultieren heißen linear, wenn keine zusätzlichen Terme hinzugefügt werden.

meinen bessere Dispersions- und Dissipationseigenschaften (De und Eswaran, 2006). Jedoch erfordern die impliziten Abhängigkeiten der Ableitungen untereinander die Lösung eines globalen Gleichungssystems, wodurch kompakte Schemen in parallelisierten Modellen einen erheblichen Kommunikationsaufwand hervorrufen.

Durch die Multiplikation diskreter Variablen im Advektionsterm entstehen Aliasingfehler. Dabei wird das Produkt zweier kurzwelliger Moden als langwellige Mode fehlinterpretiert. Dies kann dazu führen, dass bei der Simulation turbulenter Strömungen sehr viel Energie entgegen der Energiekaskade von den kleinen zu den großen Skalen transportiert wird. Mit steigender Ordnung der Diskretisierung steigt die Anfälligkeit für Aliasingfehler (Sengupta und Nair, 1999). Diffusive Schemen sind jedoch aufgrund der Dämpfung kurzwelliger Moden kaum von Aliasingfehlern betroffen.

ψ ist in der Advektionsgleichung (3.1) eine konservative Größe, d.h. ψ kann sich in einem abgeschlossenen Volumen nur durch Flussdivergenzen an den Rändern eines Volumens ändern. Ein Advektionsschema heißt konservativ bzgl. einer Größe, wenn diese Erhaltungseigenschaft auch diskret gilt. Besonders bei hohen Reynolds-Zahlen ist die diskrete Erhaltung einer Größe und deren Quadrat eine wichtige numerische Eigenschaft. So sind zum Beispiel Schemen, die das Quadrat einer Größe erhalten gleichzeitig energierhaltend, was besonders bei der Advektion von Impuls in Bezug auf die TKE eine große Rolle spielt. Erhaltungseigenschaften hängen stark von dem gewählten Gittertyp sowie von der Formulierung des Advektionsterms ab. Im Fall einer inkompressiblen Strömung sind die

- advektive Form: $u \frac{\partial \psi}{\partial x}$
- Flussform: $\frac{\partial u \psi}{\partial x}$
- schiefsymmetrische Form: $\frac{1}{2} u \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial u \psi}{\partial x}$

physikalisch identisch, deren numerische Diskretisierung und Eigenschaften im Allgemeinen jedoch nicht. Diskretisierungen der advektiven Form weisen keine Erhaltungseigenschaften auf. In Flussform formulierte Verfahren erhalten eine Größe. Die Erhaltung des Quadrates einer Größe kann mit der schiefsymmetrischen Form erreicht werden (Morinishi et al., 1998). Im Fall diffusiver Schemen gilt die quadratische Erhaltungseigenschaft jedoch nicht. Damit ist die numerische Diffusion immer eine Senke für die TKE. Schiefsymmetrische Formulierungen haben auch den Vorteil Aliasingfehler zu minimieren.

Die gesonderte Betrachtung der Approximation des Advektionsterms liefert wichtige Hinweise auf die grundsätzlichen Eigenschaften der Diskretisierung. Eine endgültige Analyse der Eigenschaften kann jedoch nur in Verbindung mit der zeitlichen Approximation erfolgen. Die Stabilitätseigenschaften eines Zeitschrittverfahrens hängen maßgeblich vom verwendeten Advektionsschema ab, umgekehrt zeigen Dispersions- und Dissipationseigenschaften eines Advektionsschemas Abhängigkeiten vom Zeitschrittverfahren. Für weiterführende Informationen wird auf Durran (1999) verwiesen.

3.2 Advektionsverfahren höherer Ordnung von Wicker-Skamarock

Ausgehend von der eindimensionalen Advektionsgleichung in Flussform

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial(u\psi)}{\partial x}, \quad (3.3)$$

kann der Advektionsterm entsprechend der Erhaltungseigenschaften als Divergenz von Flüssen

$$-\frac{\partial(u\psi)_j}{\partial x} = -\frac{F_{j+\frac{1}{2}}(u\psi) - F_{j-\frac{1}{2}}(u\psi)}{\Delta x} \quad (=: f_j^n) \quad (3.4)$$

formuliert werden. $F_{j\pm\frac{1}{2}}$ sind die um eine halbe Gitterweite in positive bzw. negative Raumrichtung versetzten Flüsse an den Rändern der jeweiligen Gitterbox. f_j^n bezeichnet die diskretisierte Flussdivergenz der Ordnung n . Wicker und Skamarock (2002) geben folgende explizite Diskretisierungen auf dem Arakawa-C Gitter für die Flüsse vierter (WS4), dritter (WS3), sechster (WS6) sowie fünfter (WS5) Ordnung an:

$$F_{j-\frac{1}{2}}^4 = \frac{u_{j-\frac{1}{2}}}{12} [7(\psi_j + \psi_{j-1}) - (\psi_{j+1} + \psi_{j-2})] \quad (3.5)$$

$$F_{j-\frac{1}{2}}^3 = F_{j-\frac{1}{2}}^4 - \frac{|u_{j-\frac{1}{2}}|}{12} [3(\psi_j - \psi_{j-1}) - (\psi_{j+1} - \psi_{j-2})] \quad (3.6)$$

$$F_{j-\frac{1}{2}}^6 = \frac{u_{j-\frac{1}{2}}}{60} [37(\psi_j + \psi_{j-1}) - 8(\psi_{j+1} + \psi_{j-2}) + (\psi_{j+2} + \psi_{j-3})] \quad (3.7)$$

$$F_{j-\frac{1}{2}}^5 = F_{j-\frac{1}{2}}^6 - \frac{|u_{j-\frac{1}{2}}|}{60} [10(\psi_j - \psi_{j-1}) - 5(\psi_{j+1} - \psi_{j-2}) - (\psi_{j+2} - \psi_{j-3})] \quad (3.8)$$

Die Diskretisierung für den Fluss fünfter Ordnung setzt sich aus dem Fluss sechster Ordnung und einem künstlich hinzugefügten Dissipationsterm zusammen. Beide Terme werden durch Linearkombination von Taylorreihenentwicklungen für $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ bzw. $\frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6}$ erhalten. Der Fluss dritter Ordnung besteht entsprechend aus einem Dissipationsterm und dem Fluss vierter Ordnung. Die sechste Ableitung stellt ein Maß für die Glätte der diskreten Funktion ψ dar, wodurch entsprechend der Anteil der numerischen Diffusion bestimmt wird. Durch den Absolutbetrag wird sichergestellt, dass der Term auch für $u < 0$ dissipativ wirkt.

Tan et al. (2005) haben verschiedene explizite Advektionsschemen höherer Ordnung untersucht und empfehlen als Kompromiss zwischen Genauigkeit, Stabilitätseigenschaften und Rechenaufwand das Verfahren fünfter Ordnung von Wicker und Skamarock (2002). Weiterhin haben Moeng et al. (2007) sowie Wang et al. (2009) WS5 schon erfolgreich bei LES-Studien der atmosphärischen Grenzschicht eingesetzt. Darauf aufbauend wird für die im weiteren Verlauf dieser Arbeit folgenden Untersuchungen WS5 verwendet.

3.2.1 Numerische Eigenschaften

Unter der Annahme konstanter Windgeschwindigkeit vereinfacht sich (3.4) für WS5 zu:

$$f_j^5 = -u \frac{-3\psi_{j+2} + 30\psi_{j+1} + 20\psi_j - 60\psi_{j-1} + 15\psi_{j-2} - 2\psi_{j-3}}{60\Delta x}. \quad (3.9)$$

Eine semidiskrete Fouriertransformation

$$\hat{\psi}_j(t) = \sum_{\kappa} (\psi_j(t) e^{i\kappa j \Delta x}) \quad (3.10)$$

bildet die Advektionsgleichung (3.3) im Fourierraum wie folgt ab:

$$\frac{\partial \hat{\psi}_{\kappa}}{\partial t} = -\frac{i}{\Delta t} C_r \kappa_{eff} \hat{\psi}_{\kappa}. \quad (3.11)$$

$\hat{\psi}$ ist die Fouriertransformierte von ψ und i eine komplexe Zahl. Durch die Courant-Zahl $C_r = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$ werden Stabilitätseigenschaften charakterisiert. Die effektive Wellenzahl κ_{eff} beschreibt die durch die Diskretisierung modifizierte Wellenzahl einer Mode. Für WS5 lautet diese:

$$\kappa_{eff}^{WS5} = \frac{i}{60} [3e^{2i\kappa\Delta x} - 30e^{i\kappa\Delta x} - 20 + 60e^{-i\kappa\Delta x} - 15e^{-2i\kappa\Delta x} + 2e^{-3i\kappa\Delta x}]. \quad (3.12)$$

Abbildung 3.1 zeigt die für Dispersions- und Dissipationsfehler verantwortlichen Real- ($\Re(\kappa_{eff})$) und Imaginärteile ($\Im(\kappa_{eff})$) der effektiven Wellenzahl für PW, WS3, WS4, WS5 und WS6. Die Normierung mit κ verdeutlicht die Abweichung zur wahren Wellenzahl. Es ist zu sehen, dass Dispersionseigenschaften für Schemen ungerader Ordnung und der nächst höherer Ordnung identisch sind. Mit steigender Ordnung reduziert sich der Dispersionsfehler und kleinere Wellenzahlen werden weniger durch Dispersion beeinflusst. Strukturen im Bereich der Gitterweite werden von keinem der Verfahren gut aufgelöst. Dissipationsfehler verringern sich mit steigender Ordnung und der Einfluss auf kleinere Wellenzahlen verringert sich. Die maximale, durch den Dissipationsterm beeinflusste Wellenlänge beträgt mit WS5 etwa $8\Delta x$. Hingegen werden mit WS3 auch Phänomene mit Wellenlängen von $16\Delta x$ beeinflusst.

Dadurch, dass die beiden Abbruchterme unabhängig voneinander sind, ist eine vollständige Dämpfung von Wiggles nicht garantiert und damit die Eigenschaft der Monotonie nicht gegeben. Mithilfe einer Flusskorrektur kann WS5 jedoch in ein monotonen Verfahren überführt werden (Skamarock, 2006).

Für die vollständige Diskretisierung der Advektionsgleichung im Fourierraum gilt im Allgemeinen (Baldauf, 2008):

$$\hat{\psi}_{\kappa}^{n+1} = A(\kappa, C_r) \hat{\psi}_{\kappa}^n. \quad (3.13)$$

A wird als Verstärkungsfaktor bezeichnet und hängt von der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung, der Wellenzahl einer Mode sowie von der Courant-Zahl ab.

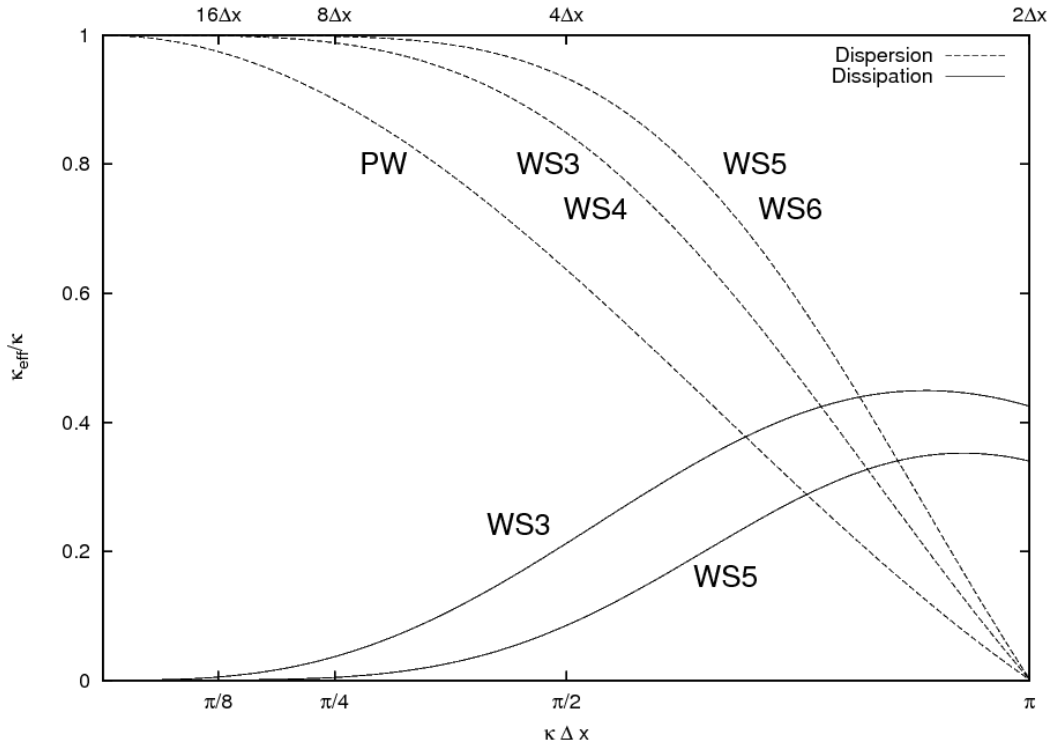


Abbildung 3.1: Real- und Imaginärteile der komplexen effektiven Wellenzahl, dargestellt als Funktion der dimensionslosen Wellenzahl $\kappa\Delta x$. Realteile repräsentieren Dispersionsfehler, Imaginärteile Dissipationsfehler. Zusätzlich ist zur besseren Übersicht die zur dimensionslosen Wellenzahl zugehörige Wellenlänge gekennzeichnet.

Nach Baldauf (2008) besitzen alle Runge-Kutta Verfahren dieselben Stabilitätseigenschaften, wenn die in Abschnitt 2.5.2 gegebenen RK-Koeffizienten einen Satz algebraischer Gleichungen erfüllen (hier für ein Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung dargestellt):

$$\beta_{4,1} + \beta_{4,2} + \beta_{4,3} = 1, \quad (3.14)$$

$$\beta_{4,2}\beta_{2,1} + \beta_{4,3}(\beta_{3,1} + \beta_{3,2}) = \frac{1}{2}, \quad (3.15)$$

$$\beta_{4,2}\beta_{2,1}^2 + \beta_{4,3}(\beta_{3,1} + \beta_{3,2})^2 = \frac{1}{3}, \quad (3.16)$$

$$\beta_{4,3}\beta_{3,2}\beta_{2,1} = \frac{1}{6}. \quad (3.17)$$

Einsetzen der Koeffizienten zeigt, dass die Stabilitätsanalyse in Baldauf (2008) auch für RK3^{PALM} gilt.

$|A| \leq 1$ ist ein hinreichendes Kriterium für eine stabile numerische Lösung. Andererseits werden Moden mit $|A| > 1$ verstärkt und instabil. Der Betrag des Verstärkungsfaktors ist als Funktion der Wellenzahl bei verschiedenen Courant-Zahlen für WS5 in Verbindung mit RK3 in Abbildung 3.2 aufgetragen. Moden bei einer Wellenzahl von $\kappa = 1.69$ sind am anfälligsten und werden am ehesten instabil. Die maximal stabile

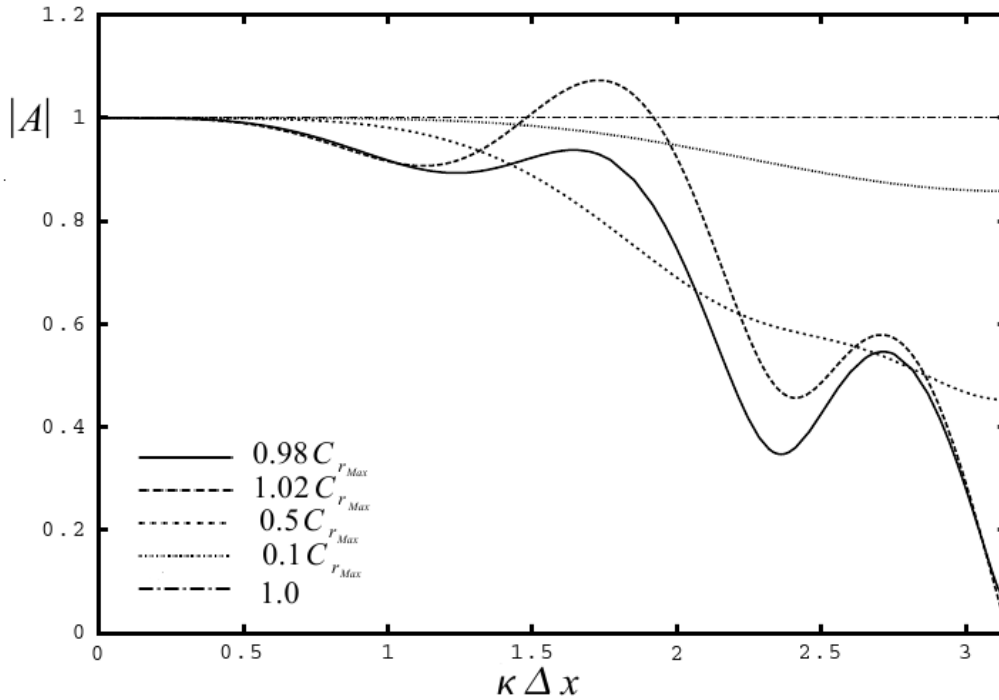


Abbildung 3.2: Verstärkungsfaktor für WS5 in Verbindung mit einem Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung bei verschiedenen Courant-Zahlen. Die maximale Courant-Zahl beträgt 1.434 (nach Baldauf, 2008).

Courant-Zahl beträgt $C_r = 1.434$. Bei n-dimensionaler Advektion muss

$$|C_{r_1}| + \dots + |C_{r_n}| \leq |C_{r_{Max}}| \quad (3.18)$$

erfüllt sein, da ansonsten Wellen die sich in Richtung der Gitterdiagonalen ausbreiten, instabil werden können (Baldauf, 2008). WS5 ist in Verbindung mit dem Leap-Frog und Eulerzeitschrittverfahren instabil. Mit Runge-Kutta Verfahren zweiter Ordnung neigen kleine Wellenzahlen bei längerer zeitlicher Integration zu Instabilitäten (Baldauf, 2008). Die hier vorgenommene Stabilitätsanalyse bezieht sich nur auf die lineare Advektionsgleichung. Für den Fall nichtlinearer Advektion sind die analytischen Stabilitätsgrenzen nicht bekannt. Bei Tests für die nichtlineare Impulsadvektion mit **PALM** liegt die maximal stabile Courant-Zahl bei 1.4.

Durch $RK3^{PALM}$ entstehen ebenfalls Abbruchfehler, die zu Dispersion und Dissipation führen. Der kombinierte Effekt aus zeitlicher und räumlicher Approximation auf den Abbruchfehler wird durch $\Re(A)$ sowie $\Im(A)$ repräsentiert. Eine Analyse der Real- und Imaginärteile von A ist sehr zeitaufwendig und daher nicht im Umfang dieser Arbeit enthalten. Nach Hundsdorfer et al. (1995) dominiert der räumliche Diskretisierungsfehler bei der Approximation der Advektionsgleichung und der zeitliche kann vernachlässigt werden.

3.2.2 Advektionstests

An dieser Stelle werden Ergebnisse durchgeführter Advektionstests vorgestellt und diskutiert. Die zeitliche Integration in dem dazu verwendeten Fortran90-Programm ist mit dem RK3^{PALM} Verfahren realisiert. Das räumliche Gitter ist vom Typ Arakawa-C. Für die hier verwendeten ein- und zweidimensionalen Testfälle existiert eine analytische Lösung. Die Fehler ergeben sich aus der $\|L\|_2$ -Norm³:

$$\|L\|_2 = \left(\sum_i^{N_{Gitter}} \frac{(\psi_i^{num.} - \psi_i^{ana.})^2}{N_{Gitter}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.19)$$

N_{Gitter} bezeichnet die Anzahl der Gitterpunkte des Modellgebiets und $\psi_i^{num.}$ sowie $\psi_i^{ana.}$ die numerische bzw. analytische Lösung zu einem beliebigen Zeitschritt. Die Konvergenzrate eines Schemas lässt sich darüber folgendermaßen definieren (Wicker und Skamarock, 2002):

$$KR = \log_2 \left(\frac{\|L\|_{2,\Delta x}}{\|L\|_{2,\frac{\Delta x}{2}}} \right). \quad (3.20)$$

Für den eindimensionalen Testfall wird die anfängliche Verteilung einer Größe

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{1 + e^{(80|x-0.5|-12)}} \quad x \in [0, 1], \quad (3.21)$$

bei konstanter Windgeschwindigkeit zyklisch durch das Modellgebiet von links nach rechts advehiert. Um den Einfluss zeitlicher Diskretisierungsfehler auf die Lösung zu reduzieren, beträgt die Courant-Zahl $C_r = 0.001$. Der zweidimensionale Testfall ist durch den Anfangszustand

$$\psi(x, y, 0) = 4e^{-\frac{1}{36}\sqrt{(x-40)^2+(y)^2}} \quad \{x, y\} \in [-100, 100], \quad (3.22)$$

charakterisiert und in Abbildung 3.3 dargestellt. Das vorgegebene Geschwindigkeitsfeld ($u = -\omega y$, $v = \omega x$) mit der Winkelgeschwindigkeit $\omega = \frac{2\pi}{400}$ ist divergenzfrei und weist eine zyklonale Rotation auf. Die Ränder des Modellgebiets sind zyklisch. Mit zunehmenden Abstand von der Mitte des Modellgebiets nimmt die Courant-Zahl zu und erreicht an den Ecken einen Maximalwert von $C_{r_{Max}} = 1.26$. Dieser Testfall stellt nach De und Eswaran (2006) hohe Anforderungen an ein Schema bezüglich der Dispersions- und Dissipationseigenschaften.

Abbildung 3.4 zeigt die Ergebnisse⁴ des eindimensionalen Advektionstests. Um den Effekt des künstlichen Dissipationsterms zu veranschaulichen, ist zusätzlich die Lösung mit WS6 dargestellt. In Übereinstimmung mit den in Abschnitt 3.2.1 dargestellten theoretischen Erkenntnissen für den Dispersionsfehler, zeigt PW eine größere Phasenverschiebung im Vergleich zu WS5 und WS6, für die untereinander kein Unterschied in der Phasengeschwindigkeit nachzuweisen ist. Auch numerische Oszillationen

³Die $\|L\|_2$ -Norm ist auch als Euklidische-Norm bekannt und wird in der Numerik häufig verwendet um die Konvergenz numerischer Verfahren zu überprüfen.

⁴Für die Ergebnisse der idealisierten Advektionstests werden keine physikalischen Einheiten angegeben, da es sich um dimensionslose mathematische Größen handelt.

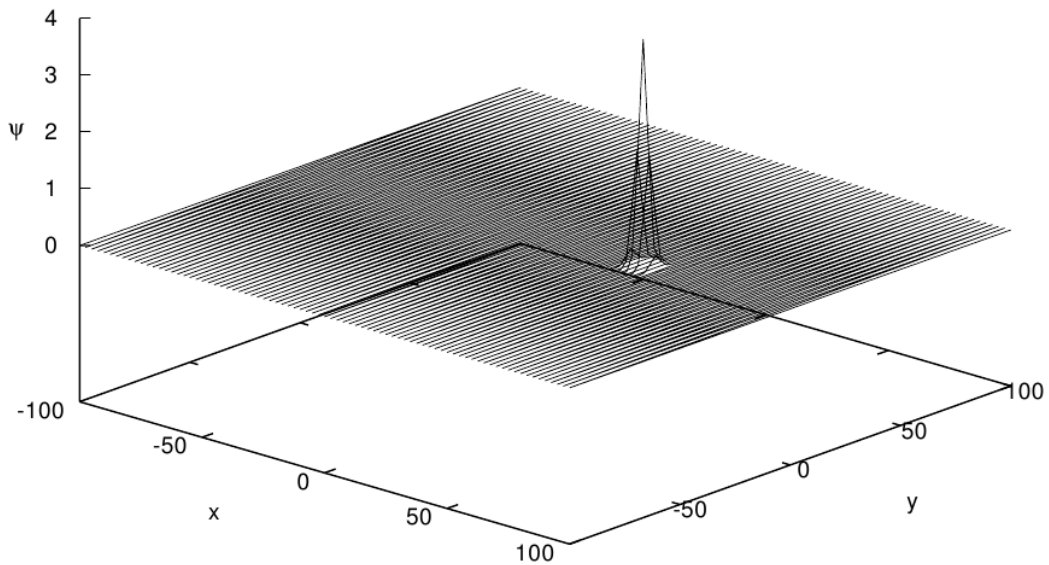


Abbildung 3.3: Anfangszustand und analytische Lösung nach 400 Zeitschritten des zweidimensionalen Testfalls.

sind mit PW deutlich ausgeprägter als bei den anderen Schemen. Mit WS6 und PW sind im gesamten Nachlauf Wiggles zu erkennen. Durch numerische Dissipation werden Wiggles mit WS5 gedämpft, sodass diese nur direkt an den Flanken der Verteilung auftreten.

Die Ergebnisse des zweidimensionalen Tests sind nach einem vollständigen Umlauf in Abbildung 3.5 zu erkennen. Nach 400 Zeitschritten ist die analytische Lösung mit dem Anfangszustand identisch. Mit WS5 beschränken sich die Oszillationen auf die direkte Umgebung der Verteilung, wohingegen diese mit PW deutlich stärker ausgeprägt sind und sich über das gesamte Modellgebiet erstrecken. Obwohl PW ein zentriertes Differenzenverfahren ist und keine numerische Dissipation aufweist, ist die Form der ursprünglichen Verteilung kaum noch erkennbar und die Amplitude stark verringert. Jede Funktion kann in einer Fourierreihe als Summe über Terme unterschiedlicher Wellenzahlen dargestellt werden. Terme mit hohen Wellenzahlen sind starken Dispersionsfehlern ausgesetzt, was in einer verringerten numerischen Phasengeschwindigkeit dieser Moden resultiert. Infolgedessen laufen die Moden bei der zeitlichen Integration auseinander, wodurch die Verteilung verbreitert und die Amplitude verkleinert wird. Die Moden mit geringerer Phasengeschwindigkeit treten dann in Form von Wiggles auf. Anhand der in Abbildung 3.6 in einem y-Schnitt dargestellten Lösung mit WS6 ist zu sehen, dass der Dispersionsfehler die Amplitude stark verringert und ausgeprägte numerische Oszillationen hervorruft. Der Dissipationsterm in WS5 bewirkt eine zusätzliche Dämpfung kurzweiliger Moden, was zu einer weiteren Verringerung der Amplitude führt. Jedoch überwiegt in Bezug auf Form und Amplitude der Verteilung in diesem Testfall der dispersive Fehler gegenüber dem Dissipativen. Die durch zeitliche Abbruchfehler hervorgerufene numerische Dissipation ist in den beiden Testfällen vernachlässigbar gering.

In Abbildung 3.7 sind die Fehler in der $\|L\|_2$ -Norm abhängig von der Gitterweite

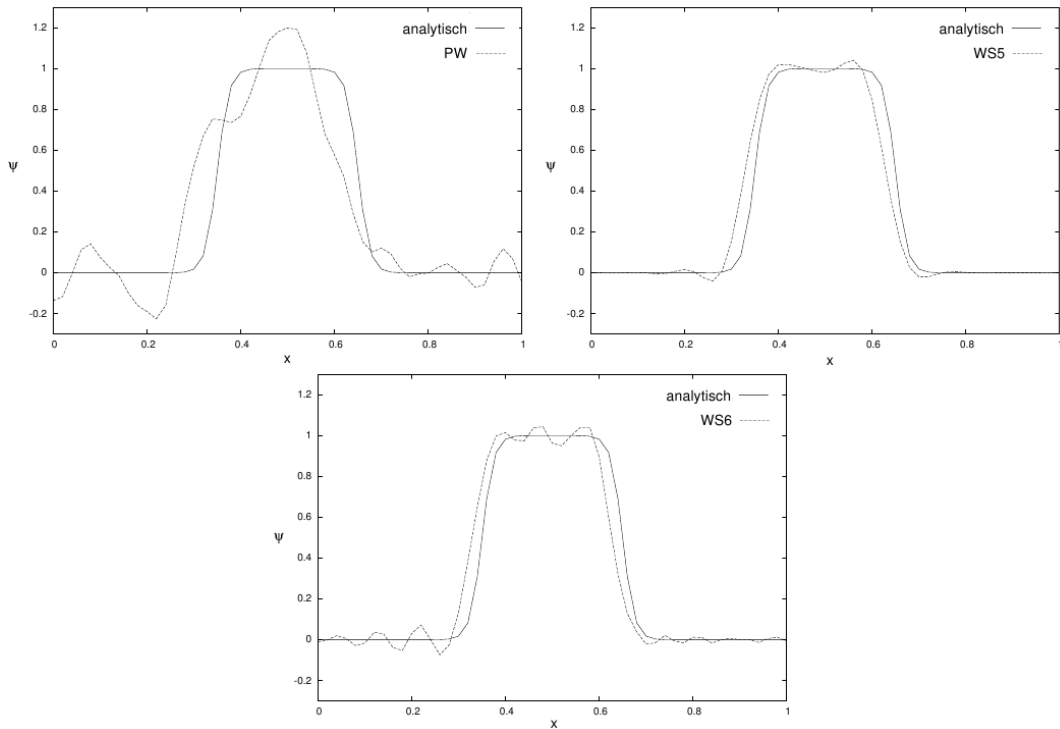
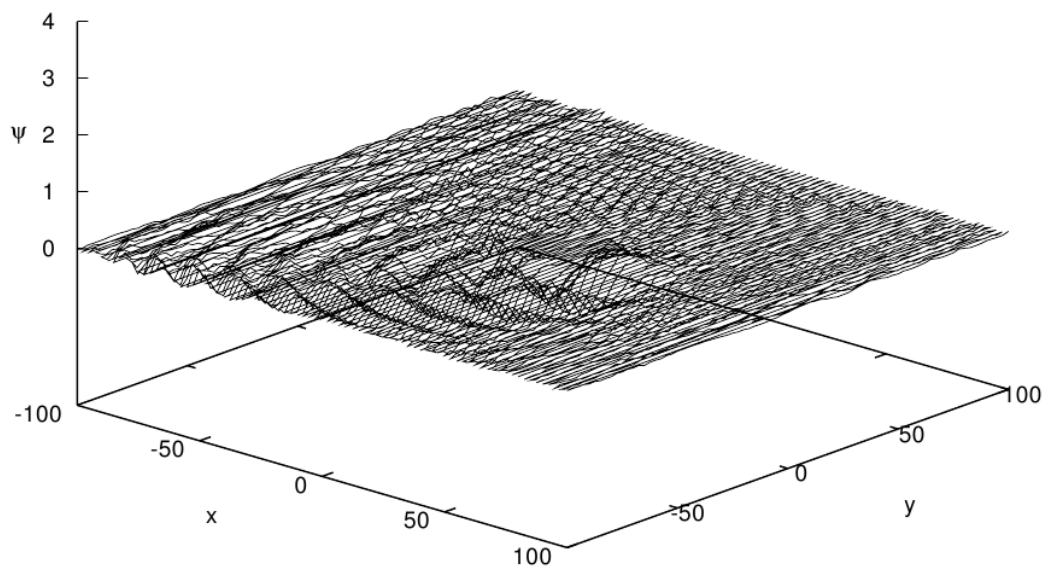
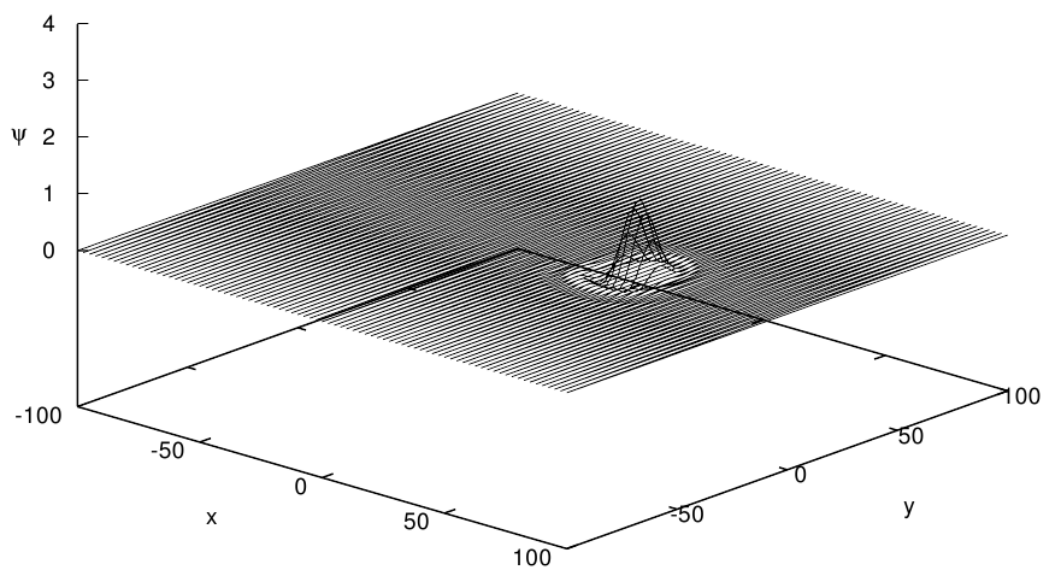


Abbildung 3.4: Lösung des eindimensionalen Advektionstests bei $C_r = 0.001$ nach einem zyklischen Durchlauf mit: PW (linke obere Seite) , WS5 (rechte obere Seite) und WS6 (unten). Die jeweils mit dargestellte analytische Lösung entspricht dem Anfangszustand. Die Anzahl der Gitterpunkte beträgt 100, die Gitterweite $\Delta x = 0.02$.

für ein- und zweidimensionale Advektionstests aufgetragen. WS5 zeigt geringere Abweichungen zur analytischen Lösung als PW. Eine Ausnahme bildet hier die kleinste verwendete Gitterweite bei dem eindimensionalen Test. In diesem Fall ist die Lösung unabhängig vom verwendeten Advektionsschema. Im Allgemeinen ist jedoch zu beobachten, dass sich bei sehr feiner Auflösung die Fehler von PW und WS5 mit kleiner werdender Gitterweite annähern. Die Steigung des Fehlers von WS5 weist in beiden Fällen einen Knick auf, wohingegen der Fehler von PW einen konstanteren Verlauf aufweist. Analog dazu sind in Abbildung 3.8 die Konvergenzraten von WS5 und PW dargestellt. Die Konvergenzraten beider Schemen weichen sowohl bei grober als auch bei sehr feiner Auflösung von ihren theoretischen Werten (fünf bzw. zwei) ab. WS5 erreicht bei grober Auflösung nur Werte zwischen zwei und drei. Mit kleiner werdender Gitterweite steigt die Konvergenzrate bis auf einen Wert von sechs an, verringert sich dann stark und pendelt sich bei sehr hoher Auflösung auf Werte zwischen eins und zwei ein. PW konvergiert bei geringer Auflösung langsamer und bei hoher Auflösung schneller gegen die analytische Lösung. Wie bereits in Abschnitt 3.2.1 erwähnt, lösen weder PW noch WS5 Strukturen mit hoher Wellenzahl gut auf. Durch große Dispersionsfehler bei grober Auflösung erhöhen Wiggles den Fehler und verringern dadurch die Konvergenzrate. Wird die advehierte Verteilung besser aufgelöst, verringert sich der Dispersionsfehler und die Konvergenzrate steigt. Mit kleiner



(a)



(b)

Abbildung 3.5: Lösung des zweidimensionalen Advektionstests nach einem vollständigen Umlauf mit: (a) PW, (b) WS5. Die Anzahl der Gitterpunkte in x- und y-Richtung beträgt 81 bei einer Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = 2.5$.

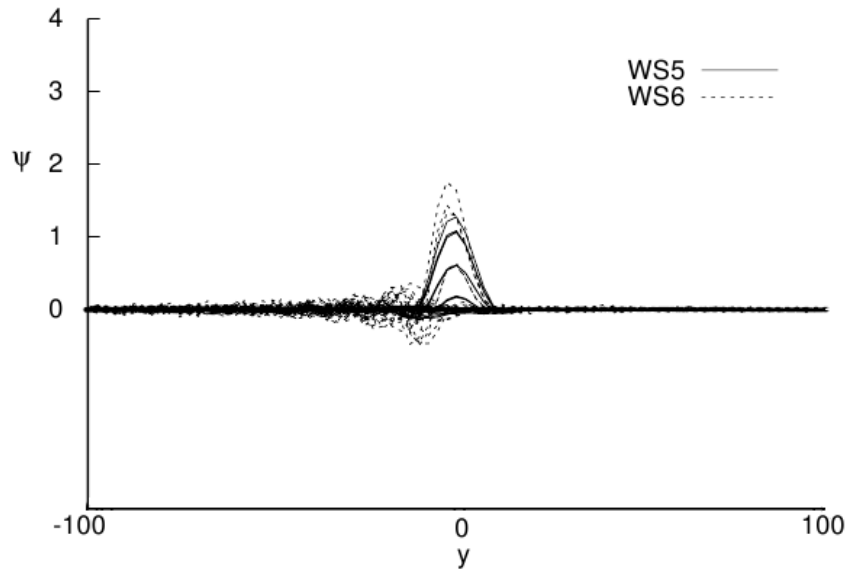


Abbildung 3.6: Lösung mit WS5 (durchgezogen) und WS6 (gestrichelt) nach einem vollständigen Umlauf. Um die direkte Auswirkung des Dissipationsterms auf die Amplitude der Verteilung darzustellen, ist das Ergebnis in einem y -Schnitt dargestellt.

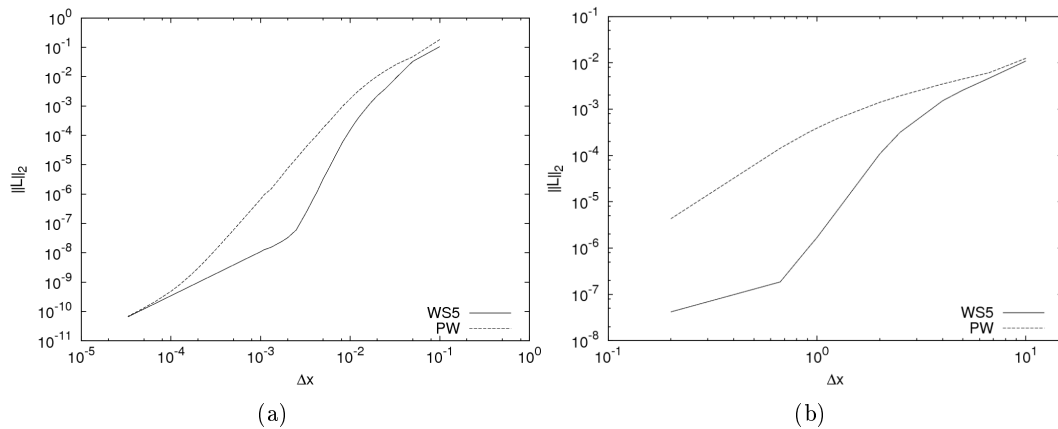


Abbildung 3.7: Fehler in der $\|L\|_2$ -Norm in Abhängigkeit von der Gitterweite für den eindimensionalen (a) und zweidimensionalen (b) Testfall. Die Fehler resultieren aus Lösungen bei gleicher Courant-Zahl und weisen daher keine Abhängigkeit vom Zeitschrittverfahren auf.

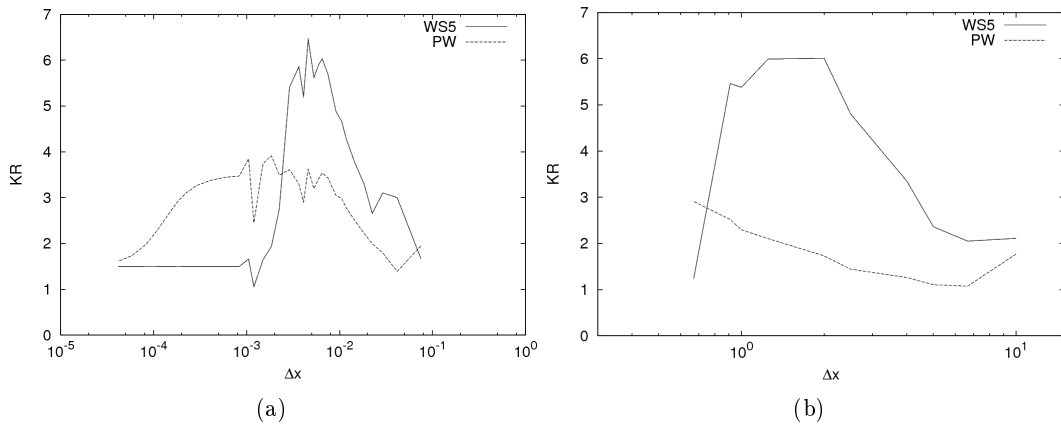


Abbildung 3.8: Konvergenzraten in Abhängigkeit von der Gitterweite für den ein-dimensionalen (a) und zweidimensionalen (b) Testfall.

werdender Gitterweite verringert sich die Konvergenzrate bei PW ebenfalls, ist in dem Bereich jedoch höher als bei WS5. Ab einer gewissen Auflösung einer Struktur erreicht die dazugehörige Wellenzahl einen Schwellwert und Abbruchfehler verringern sich mit abnehmender Gitterweite nur wenig (siehe Abbildung 3.1). Dieser Schwellwert wird bei Schemen höherer Ordnung eher erreicht und führt zu den erwähnten Knicken in der Fehlerkurve und einer starken Abnahme in der Konvergenzrate. Es ist jedoch festzuhalten, dass die hier abgebildeten Fehlerkurven und Konvergenzraten der Advektionsverfahren eine Abhängigkeit vom gewählten Testfall und der verwendeten Gebietsgröße zeigen und daher keine Allgemeingültigkeit besitzen.

Bei den durchgeführten Tests sind die Ergebnisse von PW in der Form C3 (2.39) und der modifizierten Form (2.40) aufgrund der vollständigen Divergenzfreiheit der Geschwindigkeitsfelder identisch. Des Weiteren können die von Baldauf (2008) sowie von Wicker und Skamarock (2002) theoretisch und empirisch ermittelten Stabilitätsbeschränkungen für WS5 bezüglich C_r bestätigt werden. Die Lösung mit PW bleibt bis zu einer Courant-Zahl von $C_{r_{Max}} = 1.6$ stabil.

3.3 Einfluss von Diskretisierungsfehlern auf das Subskalenmodell

Durch Verwendung von Advektionsverfahren höherer Ordnung werden numerische Abbruchfehler verringert und Strukturen besser aufgelöst. Zentrierte Verfahren höherer Ordnung besitzen jedoch keine guten Stabilitätseigenschaften, sodass für die Simulation turbulenter Strömungen Verfahren mit stabilisierender numerischer Diffusion verwendet werden müssen (Drikakis, 2003). Dissipative Schemen höherer Ordnung sind vor allem für RANS und DNS Modelle anwendbar und werden dort vielfach eingesetzt. Nach Glendening und Haack (2001) sind diese Schemen für LES Modelle nur bedingt geeignet, da die numerische Diffusion Eigenschaften des Subskalenmodells nachahmt und so mit diesem interagiert. Das führt dazu, dass ein Teil der Ge-

samtdissipation durch numerische Fehler, der andere Teil durch Parametrisierungen physikalischer Prozesse bereitgestellt wird und somit zwei Mechanismen das Turbulenzspektrum beeinflussen. Das Subskalenmodell nach Deardorff (1980) hat aber auch einen rückkoppelnden Mechanismus über die prognostische Gleichung für die subskalige TKE, sodass sich die physikalische Dissipation in Abhängigkeit von der Numerischen einstellt (Park et al., 2004). Jedoch agieren numerische und physikalische Dissipation auf verschiedenen Skalen. So dissipiert das Subskalenmodell nur Strukturen bei κ_{\max} , wohingegen die numerische Dissipation auch Strukturen kleiner κ_{\max} dämpft und somit als expliziter Filter mit der Filterweite Δ_{eff} agiert. Δ_{eff} wird auch als effektive Filterweite bezeichnet und bestimmt sich aus der impliziten Filterung durch das Gitter, dem Subskalenmodell und der effektiven Wellenzahl κ_{eff} des verwendeten Advektionsschemas. Da letztere einen erheblichen Einfluss auf kleinskalige Strukturen besitzt, verringert sich im Allgemeinen die effektive Filterweite mit zunehmender Ordnung des verwendeten Advektionsschemas und nähert sich der in Abschnitt 2.1 definierten Abschneidelänge an (Sengupta und Nair, 1999).

Der Energietransfer von den großen zu den kleinen Skalen wird nicht nur durch physikalische Prozesse beeinflusst, sondern auch durch Dispersionsfehler. Damit verbundene kleinskalige numerische Oszillationen transferieren zusätzliche Energie von den größerskaligen zu den kleinskaligen Strukturen. Der zusätzliche Energietransfer und die daraus resultierende erhöhte physikalische und numerische Dissipation modifizieren die Turbulenzspektren. Wenn das Subskalenmodell nicht genügend physikalische Dissipation bereitstellt, kann sich so im Fall nichtdiffusiver Schemen sehr viel Energie bei κ_{\max} ansammeln. Durch Verwendung von Schemen höherer Ordnung verschiebt sich dieser Mechanismus hin zu größeren Wellenzahlen. Subskalenmodelle wie das nach Deardorff (1980) interagieren mit Diskretisierungsfehlern, obwohl die Parametrisierungen unabhängig von diesen entwickelt wurden. Dies führt zu einer verminderten effektiven Auflösung der betrachteten Strömung (Park et al., 2004). Eine weiterführende Analyse der Zusammenhänge zwischen Diskretisierungsfehlern und Subskalenmodell wird in Abschnitt 5.4 anhand von Simulationsergebnissen für eine neutrale Grenzschicht gegeben.

Es existieren verschiedene Ansätze, bei denen die numerische Dissipation die physikalische vollständig ersetzt und kein Subskalenmodell benötigt wird. Dabei fließen die subskaligen Parametrisierungen direkt in die Numerik mit ein und werden implizit berechnet. Weiterführende Informationen dazu sind unter den Stichworten implizite Turbulenzmodellierung oder MILES (Monotonically Integrated LES) zu finden.

3.4 Kontrolle der numerischen Dissipation

Bei idealisierten Advektionstests liefert WS5 verglichen mit WS6 bessere Ergebnisse. Im Falle turbulenter Strömungen kann der Einfluss der enthaltenen Dissipation auf kleinskalige Strukturen jedoch nicht vernachlässigt werden. Um den Einfluss numerischer Dissipation auf das Subskalenmodell zu minimieren, werden an dieser Stelle verschiedene Ansätze zur Kontrolle der numerischen Dissipation vorgestellt. Die Idee der Dissipationskontrolle beruht darauf, numerische Dissipation so zu steuern, dass Stabilitätseigenschaften erhalten und numerische Oszillationen reduziert werden, oh-

ne dabei die eigentlichen turbulenten Strukturen unnötig zu dämpfen. Die folgenden Methoden basieren auf der Wichtung des Dissipationsterms mit einem Faktor $\gamma \in [0, 1]$.

Bei der ersten Methode (D1) von Tajallipour et al. (2009) stellt sich die numerische Dissipation abhängig von der Intensität einer Schwingung dynamisch ein. Sind zwei der drei folgenden Bedingungen erfüllt

$$(\psi_j - \psi_{j-1})(\psi_{j+1} - \psi_j) \leq \chi, \quad (3.23)$$

$$(\psi_{j+2} - \psi_{j+1})(\psi_{j+1} - \psi_j) \leq \chi, \quad (3.24)$$

$$(\psi_j - \psi_{j-1})(\psi_{j-1} - \psi_{j-2}) \leq \chi, \quad (3.25)$$

wird γ lokal um einen Faktor erhöht, andernfalls verringert. $\chi \leq 0$ ist ein frei wählbarer Schwellwert zur Differenzierung zwischen Turbulenz und Wiggles.

Der zweite Kontrollmechanismus (D2) von Sjögreen und Yee (2004) unterscheidet turbulente Strukturen von Wiggles, indem die Glattheit einer Größe ψ auf verschiedenen groben Gittern betrachtet wird. Auf dem jeweils nächst gröberen Gitter ist ψ durch

$$\psi_j^m = \psi_{2j}^{m-1}, \quad m \in 0, \dots, M \quad (3.26)$$

gegeben, d.h. auf dem Gitter m ist nur jeder zweite Punkt vom Gitter $m-1$ bekannt. Diese Vergrößerung wird bis zum Gitter M durchgeführt. Dort beginnend wird $\tilde{\psi}_{2j-1}^{m-1}$ auf dem nächst feineren Gitter durch lineare Interpolation von ψ_j und ψ_{j-1} ermittelt. Der Interpolationsfehler d_j^m wird mithilfe des bekannten Wertes ψ_{2j-1}^{m-1} für jeden Gitterpunkt bestimmt:

$$d_j^m = \psi_{2j-1}^m - \tilde{\psi}_{2j-1}^m. \quad (3.27)$$

Dies wird so lange fortgeführt, bis alle Interpolationsfehler für jeden Gitterpunkt auf jedem Gitterlevel bekannt sind. Anschließend wird das lokale Maximum des Interpolationsfehlers r_j^m in einer bestimmten Umgebung abhängig von m ermittelt. Sjögreen und Yee (2004) geben folgenden Zusammenhang zwischen Fehler und Gitterlevel:

$$r_j^m = e^{\alpha m + c}, \quad (3.28)$$

mit den Parametern α und c , die durch eine nichtlineare Regression ermittelt werden. Dabei dient α als Detektor für Wiggles. $\alpha = 0$ weist dabei auf numerische Oszillationen, $\alpha = 1$ auf turbulente Strukturen hin. Für die endgültige Berechnung von γ machen Sjögreen und Yee (2004) folgenden Vorschlag:

$$\gamma(\alpha) = 0.5 + \frac{1}{\pi} \arctan(300(0.5 - \alpha)). \quad (3.29)$$

Für weiterführende Informationen und mathematische Hintergründe wird auf Sjögreen und Yee (2004) verwiesen.

Der dritte, in dieser Arbeit entwickelte Ansatz (D3) basiert auf der Annahme, dass Wiggles turbulente Strukturen lokal überlagern und somit die Varianz in der Umgebung erhöhen, die gemittelte globale Varianz in einer Raumrichtung aber kaum

3.4 Kontrolle der numerischen Dissipation

beeinflussen. Dazu wird die lokale Varianz aus den Werten ψ_j der umliegenden Gitterpunkte berechnet:

$$\sigma_{\psi_j}^{lokal} = \frac{1}{N^{lokal} - 1} \left[\sum_{j-p}^{j+p} (\psi_j - \overline{\psi_j})^2 \right], \quad \text{mit } N^{lokal} = 2p + 1. \quad (3.30)$$

$\overline{\psi_j}$ ist das lokale räumliche Mittel und N^{lokal} ist die Anzahl der Gitterpunkte die in die Berechnung des lokalen Mittels und der Varianz einfließen. Der Quotient aus lokaler und globaler Varianz ist ein Maß für die Intensität der Wiggles an einem Gitterpunkt. Für den Fall, dass keine Wiggles auftreten, der Quotient aber $\cong 1$ ist, garantiert ein Faktor $C_{Diss} \leq 1$, dass nicht das volle Maß an numerischer Diffusion eingesetzt wird. Anschließend wird der Kontrollparameter

$$\gamma_j = C_{Diss} \frac{\sigma_{\psi_j}^{lokal}}{\sigma_{\psi}} \quad (3.31)$$

noch auf ein Intervall zwischen $[0, 1]$ beschränkt.

Erste Testergebnisse der Kontrollmechanismen sind in Abbildung 3.11 - Abbildung 3.13 zu sehen. Zusätzlich sind in Abbildung 3.9 und Abbildung 3.10 die Ergebnisse von WS5 sowie WS6 noch einmal als Referenz abgebildet. Die Anfangsbedingungen sind identisch mit den in Abschnitt 3.2.2 vorgestellten zweidimensionalen Rotationstests. Es ist die unterschiedliche Skalierung in den einzelnen Graphiken zu beachten.

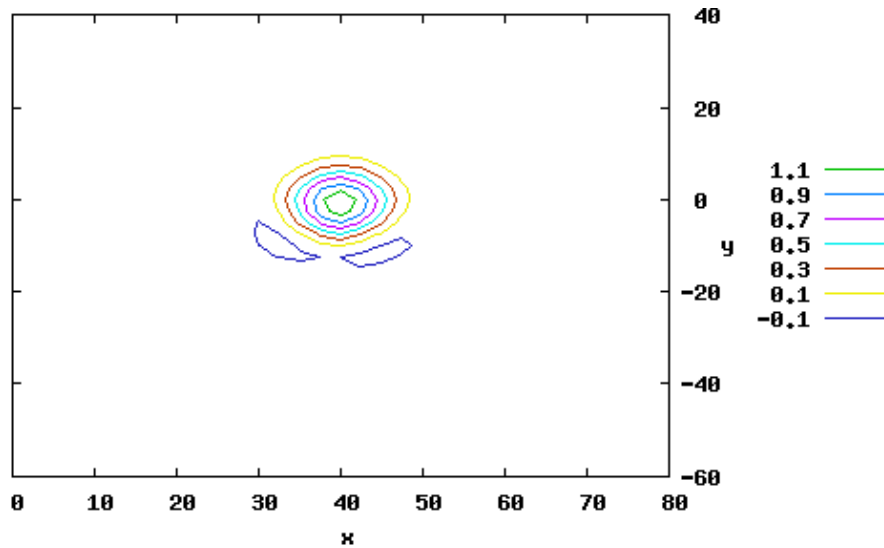


Abbildung 3.9: Isolinienabildung der Verteilung nach 400 Zeitschritten mit WS5.

Um die Amplitude der Verteilung hervorzuheben ist nur ein Ausschnitt des verwendeten Modellgebiets abgebildet. Das Maximum liegt bei 1.27, das Minimum bei -0.17 .

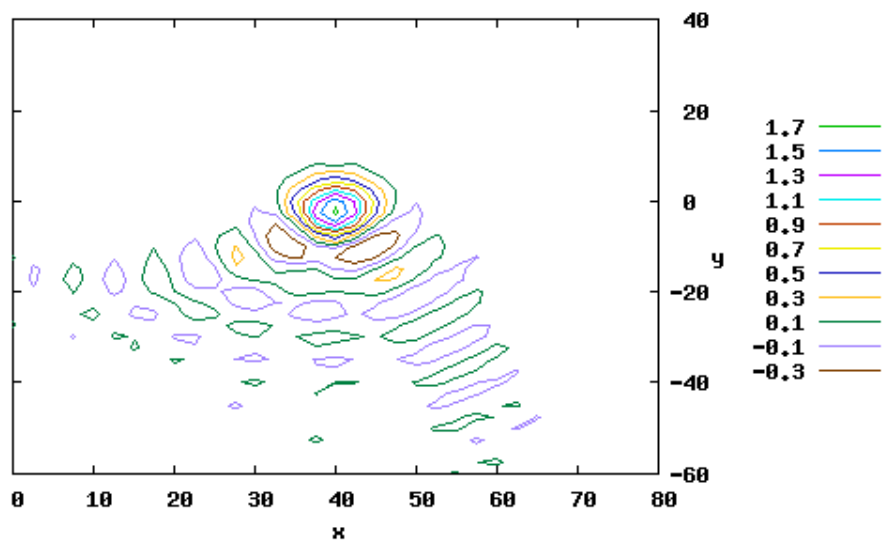


Abbildung 3.10: Isoliniendarstellung der Verteilung mit WS6. Das Maximum liegt bei 1.63, das Minimum bei -0.52 .

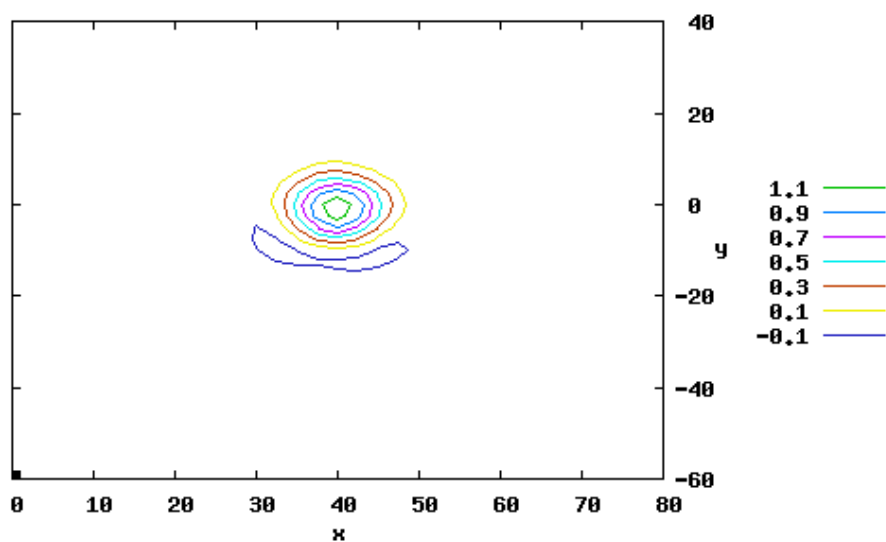


Abbildung 3.11: Isoliniendarstellung der Verteilung mit WS5 modifiziert mit D1. Der verwendete optionale Schwellwert χ beträgt null. Das Maximum liegt bei 1.25, das Minimum bei -0.21 .

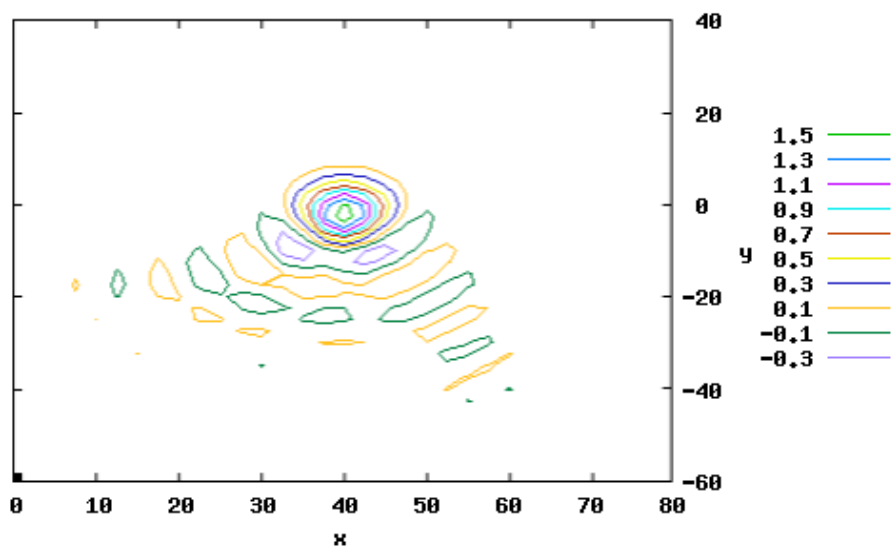


Abbildung 3.12: Isoliniendarstellung der Verteilung mit WS5 modifiziert mit D2. Die Anzahl der verwendeten Gitterlevel beträgt vier. Das Maximum liegt bei 1.59, das Minimum bei -0.49 .

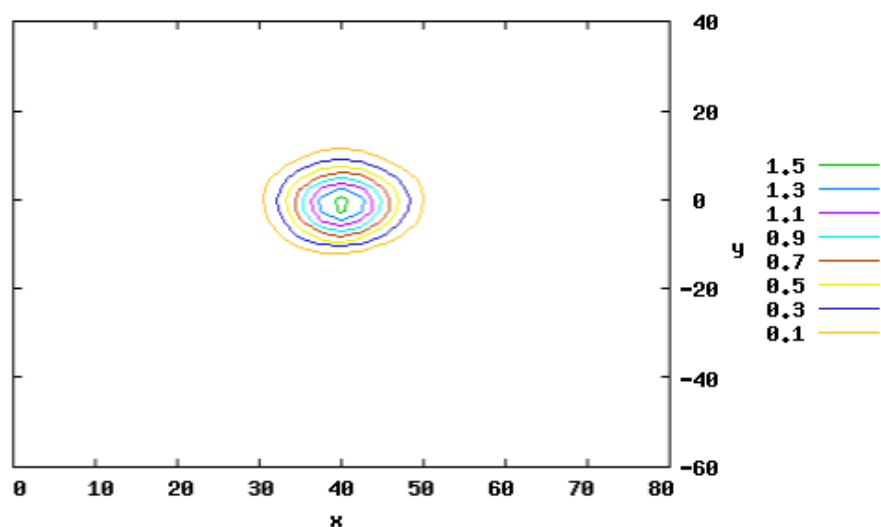


Abbildung 3.13: Isoliniendarstellung der Verteilung mit WS5 modifiziert mit D3. Die in D3 enthaltene Konstante C_{Diss} beträgt eins. Das Maximum liegt bei 1.57, das Minimum bei -0.03 .

Die Intensität der Wiggles kann anhand der in den Graphiken angegebenen Minima abgeleitet werden. Mit D1 sind kaum Unterschiede in der Wiggleintensität und in der Amplitude der advehierten Verteilung zu erkennen. Auch die absoluten Werte zeigen nur geringfügige Abweichungen zu WS5. Die Amplitude der Verteilung ist mit D2 weniger gedämpft als mit WS5, jedoch treten ähnlich wie bei WS6 deutlich mehr

numerische Oszillationen im Nachlauf auf. Im Fall von D3 weist das Maximum nur einen geringfügig kleineren Wert im Vergleich zu WS6 auf. Die Intensität der Wiggles ist verglichen mit dem Originalschema WS5 ohne Dissipationskontrolle geringer. Dieses Ergebnis ist überraschend, da im ersten Moment eine geringere Wiggleintensität auf eine erhöhte Dissipation in diesen Bereichen hindeutet. γ ist jedoch auf Werte zwischen null und eins beschränkt, womit dies ausgeschlossen werden kann. Werden die dissipativen Anteile der Flüsse $F_{i\pm\frac{1}{2}}$ mit unterschiedlichen Faktoren γ_{\pm} gewichtet, ergibt sich aus einer Fouriertransformation wie in Abschnitt 3.2.1, die effektive Wellenzahl:

$$\kappa_{eff}^{D3} = i \frac{l_1 e^{3i\kappa\Delta x} + l_2 e^{2i\kappa\Delta x} + l_3 e^{i\kappa\Delta x} + l_4 + l_5 e^{-i\kappa\Delta x} + l_6 e^{-2i\kappa\Delta x} + l_7 e^{-3i\kappa\Delta x}}{60} \quad (3.32)$$

mit

- $l_1 = 1 - \gamma_+$
- $l_2 = -9 + 5\gamma_+ + \gamma_-$
- $l_3 = 45 - 10\gamma_+ + 5\gamma_-$
- $l_4 = 10\gamma_+ + 10\gamma_-$
- $l_5 = -45 - 5\gamma_+ - 10\gamma_-$
- $l_6 = -45 - 5\gamma_+ - 10\gamma_-$
- $l_7 = -1 - \gamma_-$.

Die dazugehörigen Real- und Imaginärteile sind in Abbildung 3.14 in Abhängigkeit von der Wellenzahl dargestellt. Es lässt sich erkennen, dass die Wichtung den Dissipationsfehler wie erwartet verringert. Eine unterschiedliche Wichtung der dissipativen Flüsse hat einen positiven Einfluss auf die Dispersionseigenschaften zur Folge. Es ist zu vermuten, dass dadurch ein Einfluss auf die Monotonieeigenschaften der diffusiven Flüsse genommen wird. Physikalisch diffusive Flüsse sind entgegen den Gradienten gerichtet. Numerisch diffusive Flüsse sind jedoch nicht monoton und somit nicht zwangsläufig entgegen den Gradienten gerichtet. Dies kann dazu führen, dass sich Wiggles zum Teil lokal verstärken (Knievel et al., 2007). In jedem Fall wird eine Kopplung zwischen Dissipations- und Dispersionsfehler durch die Wichtung der Dissipationsterme hervorgerufen, die im Fall von D3 am ausgeprägtesten ist. Die genaue Ursache und der Mechanismus sind leider noch nicht geklärt und erfordern weitere Untersuchungen.

Es lassen sich unter Verwendung der drei Kontrollmechanismen keine Veränderungen in den Stabilitätseigenschaften von WS5 feststellen. D1 und D2 sind beide stark von Parametern abhängig, die wiederum von der Art der Strömung abhängen. Jedoch zeigen sich auch durch Variation der darin enthaltenen Parameter kaum Verbesserungen der numerischen Eigenschaften verglichen mit dem Originalschema für diesen Testfall. Aus diesen Gründen werden D1 und D2 im Folgenden nicht weiter betrachtet. Weitere Testergebnisse für D3 für die Advektion von Impuls sowie für die Simulation einer konvektiven Grenzschicht sind in Abschnitt 5.1 und Abschnitt 5.5 zu finden.

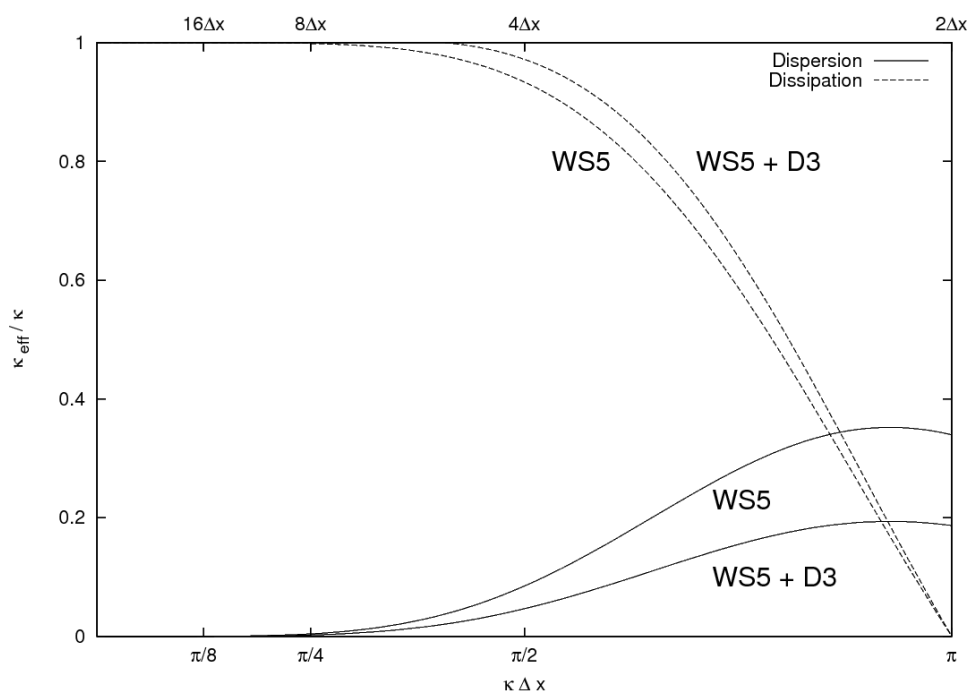


Abbildung 3.14: Dispersions- und Dissipationsfehler, dargestellt durch die Imaginär- sowie Realteile der effektiven Wellenzahl für WS5 und WS5 + D3. Dissipative Flüsse sind in diesem Fall unterschiedlich mit $\gamma_+ = 1.0$ und $\gamma_- = 0.5$ gewichtet.

4 Implementierung

Um die verbesserten Eigenschaften des Advektionsverfahrens fünfter Ordnung in **PALM** nutzen zu können, sind eine Reihe von Modifikationen im Quellcode notwendig. Daher liegt ein großer Bestandteil dieser Arbeit in der Implementierung und Rechenzeitoptimierung von WS5. Die wichtigsten dafür erforderlichen Änderungen in **PALM**, wie auch die Umsetzung von WS5 in neuen Advektionsmodulen, werden in diesem Kapitel beschrieben.

4.1 Grundlegende Änderungen

Durch die Gebietszerlegung entstehen an den Teilgebietsgrenzen der PEs lokale Datenabhängigkeiten. Im Fall von PW genügt ein Geisterrand um die lokalen Datenabhängigkeiten zu vermeiden. Hingegen werden bei WS5 dafür drei Geisterränder benötigt. Daher ist eine dynamische Anpassung der Anzahl der Geisterränder in Abhängigkeit vom gewählten Advektionsschema notwendig. Die Grenzen der Teilgebiete der PEs werden in dem Unterprogramm `init_pegrid` durch die Parameter `nxl`, `nxr`, `nys`, `nyn`, `nzb`, `nzt` festgelegt. Bisher auf einen Geisterrand statisch festgelegte Schleifengrenzen und die Speicherallokierung von Feldern werden durch Einführung neuer Parameter

```
nxlg = nxl - nbgp
nxrg = nxr + nbgp
nysg = nys - nbgp
nyng = nyn + nbgp
```

dynamisch an die benötigte Geisterrandanzahl angepasst. **nbgp** (**n**umber of **b**oundary **g**host **p**oints) nimmt je nach Advektionsschema einen Wert von 1 oder 3 an. An der Ober- und Untergrenze des Modellgebiets erfolgt bei der Vertikaladvektion ein Übergang zu Verfahren niedrigerer Ordnung (siehe Abschnitt 5.2), sodass an diesen Ränder auch mit WS5 nur ein Geisterrand benötigt wird und keine Veränderungen notwendig sind.

Der für die Geisterränder notwendige Datenaustausch zwischen den PEs wird in `exchange_horiz` und `exchange_horiz_2d` mit den nicht-blockierenden¹ Sende- und

¹Der Prozess wird im Hintergrund durchgeführt, gleichzeitig können aber auch weitere MPI-Prozesse und Anweisungen ausgeführt werden.

Empfangsfunktionen

```
mpi_isend(buf, count, datatype, ...)  
mpi_irecv(buf, count, datatype, ...)
```

bewerkstelligt. Dazu müssen u. a. die Startadresse `buf`, die Anzahl der Elemente `count` und der Datentyp `datatype` des Sende- bzw. Empfangspuffers angegeben werden. Weitere Ein- und Ausgabeparameter, die die eindeutige Zuordnung der Sende- und Empfangsprozesse sowie den Status der Kommunikation betreffen, werden an dieser Stelle nicht aufgeführt.

Angesichts des in Fortran90 spaltenweise ($k \rightarrow j \rightarrow i$) optimalen Speicherzugriffes auf Daten in mehrdimensionalen Feldern, wird der Datenaustausch zwischen linken und rechten sowie vorderen und hinteren PEs gemäß Abbildung 2.3 unterschieden. Die Daten für den Austausch zwischen vorderen und hinteren PEs liegen zusammenhängend in xz -Ebenen. Ein zusammenhängender Datenaustausch ist jedoch aufgrund des ungünstigen Speicherzugriffes ($k \rightarrow i \rightarrow j$) ungeeignet. Auch mehrfaches Aufrufen der Sende- und Empfangsfunktionen, um eine jeweils zusammenhängende Übertragung mit optimalen Speicherzugriff zu gewährleisten, erweist sich als nachteilig. Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei jedem Aufruf einer MPI-Funktion aufgrund interner Mechanismen bei der Verarbeitung eines Befehls sowie durch Signalübertragungen Verzögerungen (Latenzzeiten) entstehen. Um unnötige Latenzzeiten zu vermeiden, bietet MPI die Möglichkeit neue Datentypen mit

```
mpi_type_vector(count, blocklen, stride, oldtype, newtype)
```

zu definieren. Dazu werden die auszutauschenden Feldelemente gemäß ($k \rightarrow j \rightarrow i$) in `count` Blöcken zusammengefasst, deren Anzahl `blocklen` und Abstand `stride` voneinander fest vorgegeben ist. `oldtype` und `newtype` bezeichnen den alten und neuen Datentyp. Mithilfe dieser Blockstruktur kann optimal auf Daten im Speicher zugegriffen werden, ohne dass zusätzliche Latenzzeiten auftreten.

In Abbildung 4.1 ist der Datentransfer zwischen vorderen und hinteren sowie linken und rechten PEs für eine Richtung schematisch dargestellt. Zwischen vorderen und hinteren PEs werden wie bisher "Säulen" kommuniziert, deren Anzahl nun variabel ist. Daten für den Austausch zwischen linken und rechten PEs liegen in yz -Ebenen und können so wie bisher optimal und zusammenhängend transferiert werden. Es zeigt sich jedoch, dass weniger CPU-Zeit für den Austausch benötigt wird, wenn die zu kommunizierenden Daten zu einem neuen Datentyp zusammengefasst werden. In Abbildung 4.2 sind die Ergebnisse eines Performance-Tests auf der SGI-ALTIX bei einer jeweils eindimensionalen Gebietszerlegung mit 32 PEs für $512 \times 512 \times 32$ Gitterpunkte dargestellt. Die benötigte CPU-Zeit für den Austausch zwischen den PEs ist mit der benötigten CPU-Zeit der bisherigen Implementierung für einen Geisterstrand normiert und gegen die Anzahl der Geisterränder aufgetragen. Es ist ein linearer Anstieg der notwendigen CPU-Zeit für den Datentransfer in Abhängigkeit von der Datenmenge erkennbar. Dabei ist die stärkere Zunahme der Transferzeit zwischen vorderen und hinteren PEs auf die nicht-zusammenhängende Datenmenge zurückführbar. Beim Erstellen der MPI-Blöcke werden die Daten in hierarchisch gegliederte

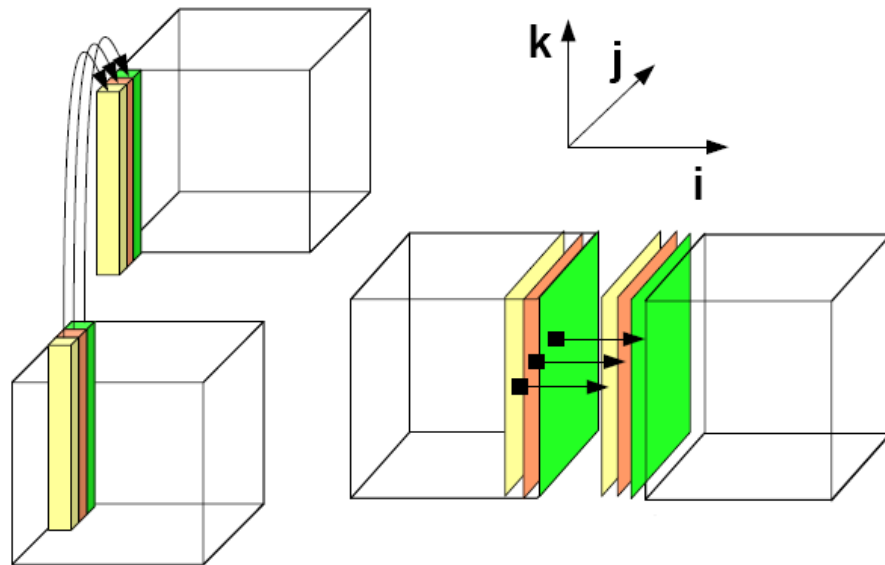


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Datentransfers von vorderen zu hinteren (linke Seite) sowie von linken zu rechten PEs (rechte Seite) gemäß $(k \rightarrow j \rightarrow i)$ bei drei Geisterrändern. Die Quader stellen die Teilgebiete der PEs dar. Pfeile kennzeichnen die Richtung des Datentransfers. Die Daten werden entsprechend der unterschiedlichen Farbdarstellung in Blöcken zusammengefasst, gemeinsam versendet und am Zielprozessor wieder in Felder geschrieben. Der Datentransfer vom vorderen zum hinteren PE ist hier nur für einen Index i abgebildet. Auf der rechten Seite ist die vollständige Übertragung der drei Geisterebenen zu erkennen. Der entgegengesetzte Austausch verhält sich in beiden Fällen äquivalent.

Zwischenspeicher (Cache-Level) geladen, um die Zugriffszeit zu verringern. Durch gewisse Kriterien, wie zum Beispiel die Häufigkeit der Zugriffe oder die physikalische Nähe der Daten im Speicher, wird der Dateninhalt der einzelnen Level gesteuert. Aufgrund begrenzter Speicherkapazitäten befinden sich nicht-zusammenhängende Daten häufig in unterschiedlichen Hierarchieebenen des Zwischenspeichers, wodurch bei jedem Zugriff auf die Daten diese erst in das höchste Cache-Level geladen werden müssen. Die dadurch entstehenden Verzögerungen treten mit zusammenhängenden Daten weniger auf, da sich diese meist in ein und derselben Hierarchieebene befinden. Aus diesem Grund wird die Steigung der Graphen auch von der Anzahl der Gitterpunkte pro PE beeinflusst. Weiterhin ist zu sehen, dass sich die CPU-Zeit für den Datenaustausch zwischen linken und rechten PEs mit MPI-Blöcken um etwa 10 % verringert, verglichen mit der bisherigen Implementierung ohne MPI-Blöcke. Dies ist vermutlich auf MPI-interne Abhängigkeiten vom verwendeten Datentyp zurückzuführen.

Zyklische Randbedingungen (2.53) werden ebenfalls in `exchange_horiz` behandelt. Liegen die gegenüberliegenden Ränder des Modellgebiets auf einem PE, wird die Umspeicherung abhängig von der Geisterrandanzahl in einer Schleife vorgenommen. Anderenfalls werden die zyklischen Randbedingungen durch Geisterrandaustausch realisiert.

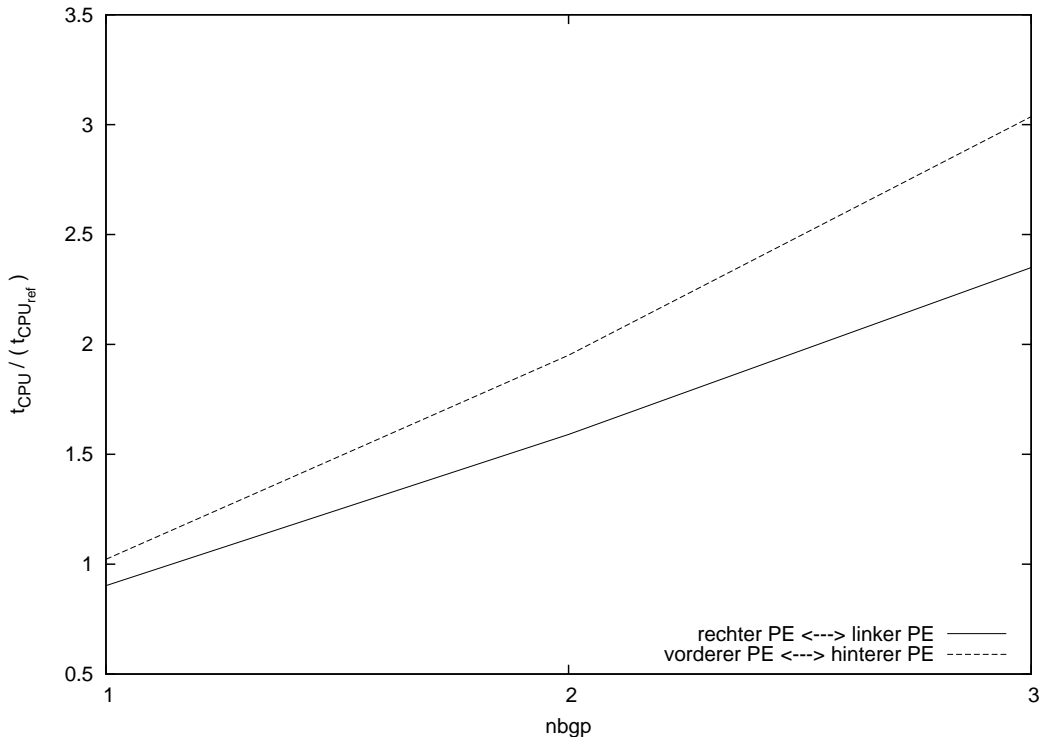


Abbildung 4.2: Benötigte CPU-Zeit in Abhängigkeit von der Geisterrandanzahl `nbgp` für den Austausch zwischen vorderen und hinteren PEs (gestrichelt) sowie linken und rechten PEs (durchgezogen). Die für die Normierung herangezogene Referenzzeit $t_{\text{CPU}_{\text{ref}}}$ ergibt sich aus der bisherigen Realisierung des Datenaustauschs für einen Geisterrand. Die Ergebnisse resultieren jeweils aus einer eindimensionalen Gebietszerlegung bei 32 PEs für $512 \times 512 \times 32$ Gitterpunkte in x-, y- und z-Richtung.

4.2 Neue Advektionsmodule

Die neuen Unterprogramme für die Advektion von Skalaren (`advec_s_ws`) und Geschwindigkeitskomponenten (`advec_u_ws`, `advec_v_ws`, `advec_w_ws`) beinhalten jeweils zwei Routinen zur Approximation des Advektionsterms mit WS5. Eine Routine ist für Vektorrechner optimiert, die andere für Rechnerarchitekturen mit mehreren Caches. Der Aufruf der Routinen wird mithilfe einer in **PALM** häufig verwendeten Operatorüberladung gesteuert. Dazu werden die Advektionsmodule mit entsprechenden Übergabeparametern in der jeweiligen Version von `prognostic_equations` aufgerufen, die dann wiederum intern die dazugehörige Routine aufrufen. Die Formulierung des Advektionsterms in Flussform (3.4) erfordert die Berechnung von Flüssen an den Rändern der Gitterboxen. Aufgrund der Erhaltung einer Größe muss der Fluss $F_{i+\frac{1}{2}}$ am Gitterpunkt i gleich dem Fluss $F_{i'-\frac{1}{2}}$ am Gitterpunkt $i' = i + 1$ sein. Infolgedessen ist die Berechnung der Flüsse an der Stelle $i - \frac{1}{2}$ nur an den Rändern der Teilgebiete notwendig, da die berechneten Flüsse an der Stelle $i + \frac{1}{2}$ zwischengespeichert und für den nächsten Gitterpunkt wiederverwendet werden können, wie in Abbildung 4.3

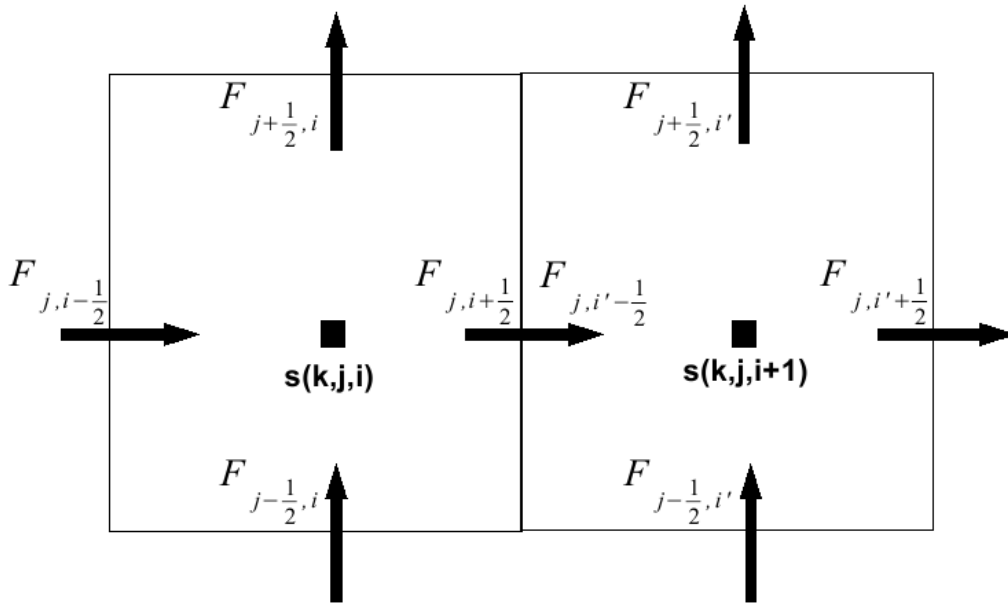


Abbildung 4.3: Darstellung der horizontalen numerischen Flüsse von Skalaren an den Rändern einer Gitterbox. Die Pfeile markieren die Richtung der Flüsse bei positiver u- und v-Komponente. i' bezeichnet den Index $i+1$. An der Stelle $(j, i + \frac{1}{2})$ sind die Flüsse $F_{j, i+\frac{1}{2}}$ und $F_{j, i'-\frac{1}{2}}$ identisch.

schematisch dargestellt ist. Dies ist bezüglich der Optimierung ein entscheidender Vorteil gegenüber Schemen wie PW, die nicht auf der Formulierung des Advektionsterms in Flussform beruhen. Infolge des Schleifendurchlaufes gemäß (i, j, k) werden vertikale Flüsse in einer Variablen und horizontale Flüsse in ein- sowie zweidimensionalen Feldern zwischengespeichert. In der für Vektorrechner optimierten Version sind diese Felder lokal deklariert, da für jeden Tendenzterm gesonderte Schleifen über i, j, k in den Routinen stehen. Dagegen stehen in der Cache-optimierten Version die Schleifen über i, j im übergeordneten Modul `prognostic_equations`, sodass für die Zwischenspeicherung globale Felder notwendig sind.

4.3 Weitere Anpassungen

Die Benutzung von WS5 ist mit Einschränkungen verbunden. So kann eine stabile Lösung der Modellgleichungen nur in Verbindung mit $RK3^{\text{PALM}}$ realisiert werden. Momentan ist WS5 noch nicht für Dirichlet- und Strahlungsrandbedingungen verfügbar. Auch das Multigrid-Verfahren zur Lösung der Poisson-Gleichung, das Turbulente Einströmen an den Rändern des Modellgebiets sowie die Berücksichtigung von Topographie bedürfen weiterer Modifikationen. Abfragen in `check_parameters` sollen entsprechende Laufzeitfehler vermeiden.

Der verwendete Zeitschritt wird u. a. über das CFL-Kriterium (2.46) berechnet. Dabei wird in **PALM** das eindimensionale minimale Verhältnis von Gitterweite zur maximal auftretenden Geschwindigkeitskomponente betrachtet. Bei Advektion entlang der Gitterdiagonalen garantiert dieses Vorgehen keine stabile Lösung, wie entsprechende Advektionstests zeigen (siehe Abschnitt 3.2.2). Um in diesem Fall eine stabile Lösung zu gewährleisten, steht eine nach Bedingung (3.18) angepasste Version für die Berechnung des Zeitschrittes zur Verfügung. Weitere Veränderungen bezüglich der Vertikaladvektion im bodennahen Bereich sowie der statistischen Auswertung turbulenter Flüsse werden an entsprechender Stelle in Abschnitt 5.2 und 5.3 näher erläutert.

5 Validierung des Advektionsverfahrens fünfter Ordnung mit PALM

Das Ziel dieser Arbeit ist die Verbesserung der numerischen Lösung der in **PALM** verwendeten Modellgleichungen. Ein Einfluss des Advektionsschemas wird vor allem in Bereichen erwartet, in denen turbulente Größen große Gradienten aufweisen. Zu Beginn des Kapitels werden Ergebnisse von Advektionstests für die Impulsadvektion¹ vorgestellt. Probleme und für deren Lösung notwendige Modifikationen bei der Vertikaladvektion sowie der statistischen Auswertung werden anschließend erläutert. Danach werden Simulationsergebnisse einer neutralen sowie konvektiven Grenzschicht unter Verwendung von WS5 und PW vorgestellt und miteinander verglichen. Damit einhergehend wird der Einfluss der Dissipationskontrolle auf die Simulationsergebnisse untersucht. Abschließend werden anhand einer LES-Vergleichsstudie Ergebnisse von Simulationen unter Verwendung von WS5 validiert und mit PW verglichen.

5.1 Verlagerung eines Rankine-Wirbels

Die Ergebnisse idealisierter Advektionstests für Skalare zeigen eine deutliche Verbesserung der numerischen Lösung unter Verwendung von WS5 im Vergleich zu PW. An dieser Stelle wird die nichtlineare Impulsadvektion anhand eines Rankine-Wirbels getestet, der mit **PALM** standardmäßig initialisiert werden kann. Ein Rankine-Wirbel weist eine vertikale Rotationsachse auf und lässt sich in einen inneren (Wirbelkern) und einen äußeren Bereich unterteilen. Der Radius des Wirbelkerns beträgt $8\Delta x$, der des gesamten Wirbels $32\Delta x$. Die Beträge der Geschwindigkeitskomponenten nehmen im Wirbelkern mit zunehmendem Abstand vom Wirbelmittelpunkt linear zu. Der äußere Bereich zeichnet sich durch eine exponentielle Abnahme in den Beträgen der Geschwindigkeitskomponenten aus. Bei der Impulsadvektion muss zu jedem RK3^{PALM}-Teilschritt die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes über die in Abschnitt 2.5.2 beschriebene Prädiktor-Korrektor Methode realisiert werden. Zu Beginn der Simulation wird der Rankine-Wirbel in `init_rankine` auf das vorgegebene höhenkonstante Geschwindigkeitsfeld $u_g = 2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $v_g = 2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ aufgeprägt und anschließend mit diesem, bei einer Courant-Zahl von $C_r = 0.5$, verlagert. An der Ober- und Untergrenze des Modellgebiets werden Gleitreibungsbedingungen für die Geschwindigkeitskomponenten verwendet. Die Prandtl-Schicht Beziehungen finden aus diesem Grund bei dieser Simulation keine Verwendung. Um die reine Advektion testen zu können, ist es notwendig, den turbulenten Diffusionskoeffizienten auf Null zu setzen. Bei einem Rankine-Wirbel befinden sich Druckgradientkraft und Zentrifugalkraft im Gleichge-

¹Es ist zu beachten, dass für einen physikalisch korrekten Impuls die Terme noch mit der Dichte multipliziert werden müssen.

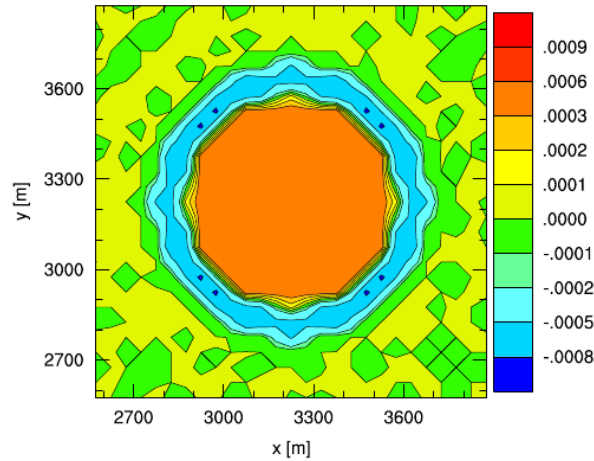


Abbildung 5.1: xy-Schnitt der Vorticity ζ [$\frac{1}{s}$] zur Zeit $t = 0$ s nach Aufruf des Drucklösers. Um den Wirbel zu veranschaulichen ist nur ein Ausschnitt des Modellgebiets in $z = 525$ m dargestellt. Die Gitterweite beträgt in alle Raumrichtungen 50 m.

wicht. Aus diesem Grund wird die Corioliskraft nicht berücksichtigt, da ansonsten eine Beschleunigung in z -Richtung erfolgen würde. Des Weiteren werden zufällige Störungen ausgeschaltet. Abbildung 5.1 zeigt die Vorticity ζ des Wirbels zu Beginn der Simulation. Der Wirbelkern weist einen konstanten Wert positiver Vorticity auf. Mit Übergang zum Wirbeläußeren verringert sich die Vorticity und es treten negative Werte auf. Kurz dahinter steigt ζ wieder an und liegt im restlichen äußeren Bereich bei Werten um Null. Die Abweichungen von Null in diesem Bereich sind auf die Modifikation des ursprünglich aufgeprägten, divergenten Geschwindigkeitsfeldes durch Anwendung der Prädiktor-Korrektor Methode zurückzuführen.

In Abbildung 5.2 sind xy-Schnitte des Wirbels zu verschiedenen Zeitpunkten durch die Vorticity veranschaulicht. Der Wirbel ist mit WS5 über die gesamte Simulationszeit von 18000 s trotz fortschreitender Deformation in seiner Struktur klar erkennbar. In der Umgebung des Wirbels treten leichte Oszillationen in der Vorticity auf. Aufgrund des zunehmenden Zerfalls und der numerischen Diffusion verringert sich die Geschwindigkeitsscherung, wodurch die Extrema der Vorticity mit zunehmender Verlagerungszeit vermindert werden. Mit PW treten im gesamten Modellgebiet Wiggles auf, die im Nachlauf des Wirbels stärker ausgeprägt sind. Infolge der zyklischen Randbedingungen überlagern sich die Wiggles, wodurch längs und quer zur Strömung ausgerichtete Muster entstehen. Der Wirbel selbst ist stark deformiert. Durch die größeren Dispersionsfehler zerfällt der Wirbel mit PW schneller und ist nach 18000 s kaum noch in seiner ursprünglichen Struktur erkennbar. Wie schon bei idealisierten Tests für die Skalaradvektion, erzielt WS5 im Vergleich zu PW auch bei der Impulsadvektion deutlich bessere Ergebnisse.

WS5 liefert in Verbindung mit der Dissipationskontrolle bei der skalaren Advektion bessere Ergebnisse als das Originalschema. Allerdings kann ein Schema bei der skalaren Advektion hervorragende Ergebnisse erzielen, bei der nichtlinearen Impulsadvektion jedoch völlig versagen (Deville et al., 2002). Abbildung 5.3 zeigt das Ergebnis nach 18000 s Simulationszeit unter Verwendung der Dissipationskontrolle. Die

5.1 Verlagerung eines Rankine-Wirbels

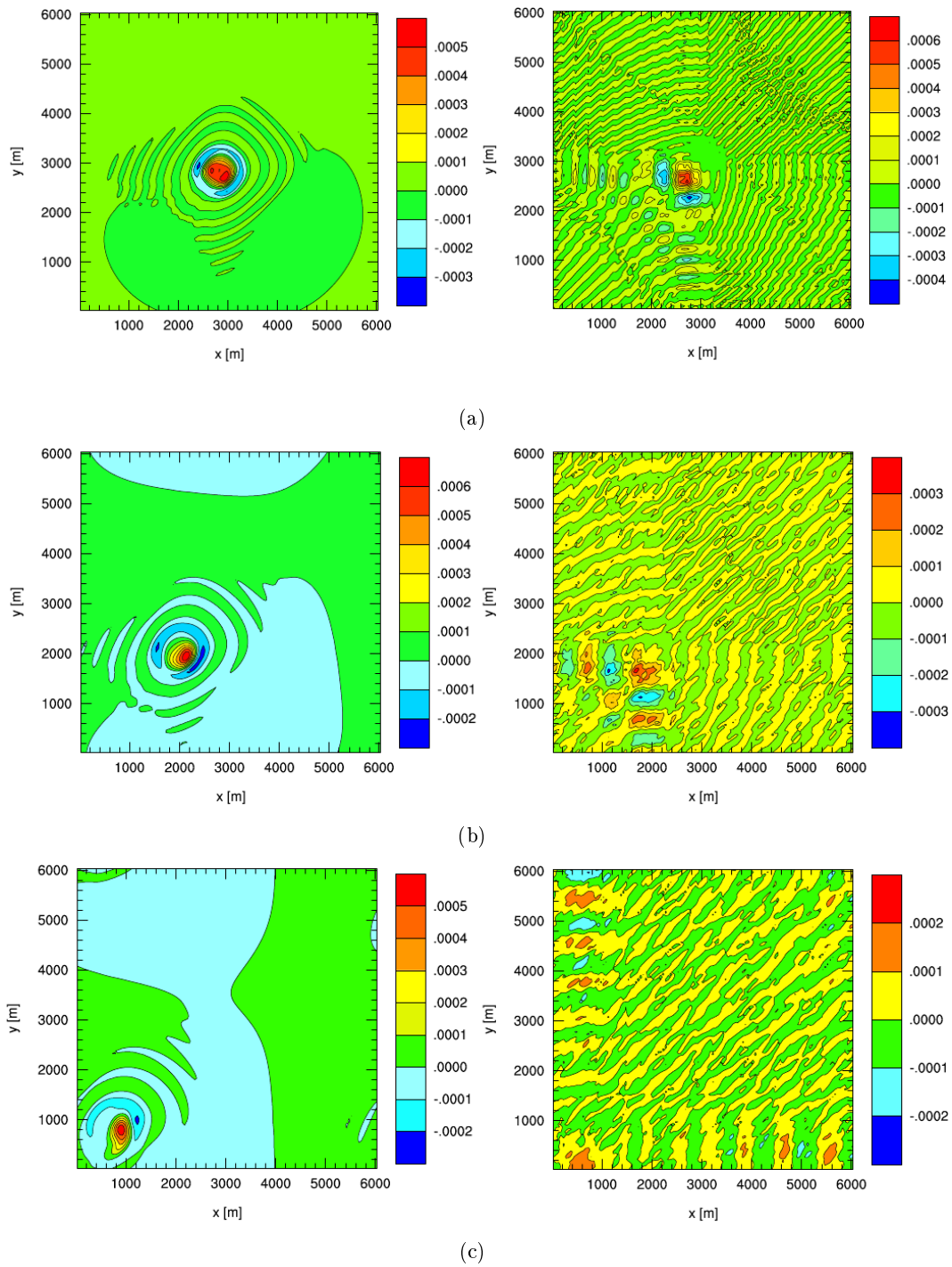


Abbildung 5.2: xy-Schnitte der Vorticity ζ [$\frac{1}{s}$] bei $z = 475$ m mit WS5 (linke Seite) und PW (rechte Seite) nach (a) 3000 s, (b) 9000 s und (c) 18000 s. Der Wirbel wird mit $u_g = 2 \frac{m}{s}$, $v_g = 2 \frac{m}{s}$ bei einer Courant-Zahl von $C_r = 0.5$ sowie einer Gitterweite von 50 m in alle Raumrichtungen zyklisch durch das Modellgebiet verlagert.

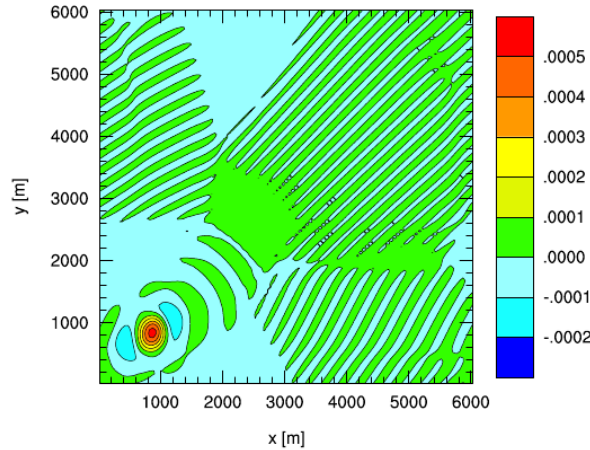


Abbildung 5.3: xy-Schnitt der Vorticity ζ [$\frac{1}{s}$] nach 18000s mit WS5 und zusätzlicher Dissipationskontrolle. Für weitere Informationen zu den Anfangsbedingungen wird auf Abbildung 5.2 verwiesen.

kreisrunde Form des Rankine-Wirbels ist mit der Dissipationskontrolle etwas besser erhalten. Die Wiggles in der direkten Umgebung des Wirbels zeigen kaum Veränderungen zu WS5. Die numerische Dissipation ist in größerer Entfernung zum Wirbel geringer, wodurch Wiggles nicht ausreichend gedämpft werden und das Modellgebiet überlagern. Für die Anwendung der Dissipationskontrolle bei der Impulsadvektion ist daher eine entsprechende Modifikation erforderlich, bevor ein Einsatz bei der Simulation turbulenter Strömungen erfolgen kann.

5.2 Vertikaladvektion

In der ersten Implementierung von WS5 wurden jeweils drei Geisterränder an der Ober- und Untergrenze des Modellgebiets verwendet. Das hat jedoch zur Folge, dass entsprechende Randwerte für die zusätzlichen Geisterränder benötigt werden. Im Fall von Neumann-Randbedingungen (2.52) entsprechen diese dem vorgegebenen Gradienten. Für Dirichlet-Bedingungen (2.51) wird den zusätzlichen Geisterrändern der Wert des schon vorhandenen Geisterrandes übergeben. In Abbildung 5.4 ist dies für die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten schematisch dargestellt. Infolge der verschwindenden Vertikalgeschwindigkeit am Boden ist PW praktisch unabhängig von dem Geisterrandwert bei $z = -\frac{\Delta z}{2}$, da dieser mit Null multipliziert wird. Bei WS5 gilt gleiches für den Fluss $F_{k-\frac{1}{2}}$ in der Höhe $z = 0$ m. Die darüberliegenden numerischen Flüsse in den Höhen $z = \Delta z$, $z = 3\Delta z$ und $z = 5\Delta z$ weisen jedoch eine Abhängigkeit von den im Boden liegenden Werten auf, da die Vertikalgeschwindigkeit in diesen Höhen in der Regel ungleich Null ist. Durch den unphysikalischen und großen Geschwindigkeitsgradienten zwischen der ersten Gitterebene im Boden und der darüberliegenden Ebene werden vermutlich die höhenabhängigen Geschwindigkeitsprofile beeinflusst. Diese Vermutung kann anhand einer neutralen Prandtl-Schicht überprüft werden, indem die nach der Ähnlichkeitstheorie (Monin und Obukhov, 1954) gelten-

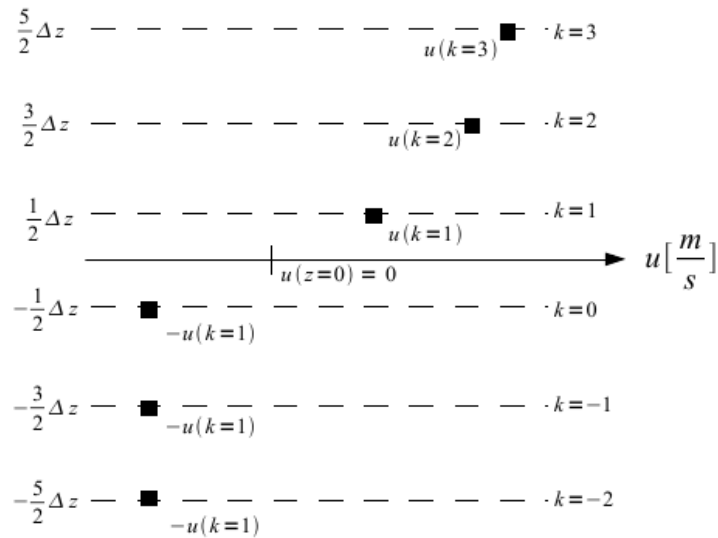


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung der Spiegelungsrandbedingung für die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten bei drei Geisterrändern im Boden. Abgebildet ist das vertikale Gitter in Bodennähe für u , v und skalare Größen. Der Wert von u in der ersten prognostischen Gitterebene bei $k = 1$ wird an $z = 0$ m gespiegelt und den Geisterrändern im Boden übergeben.

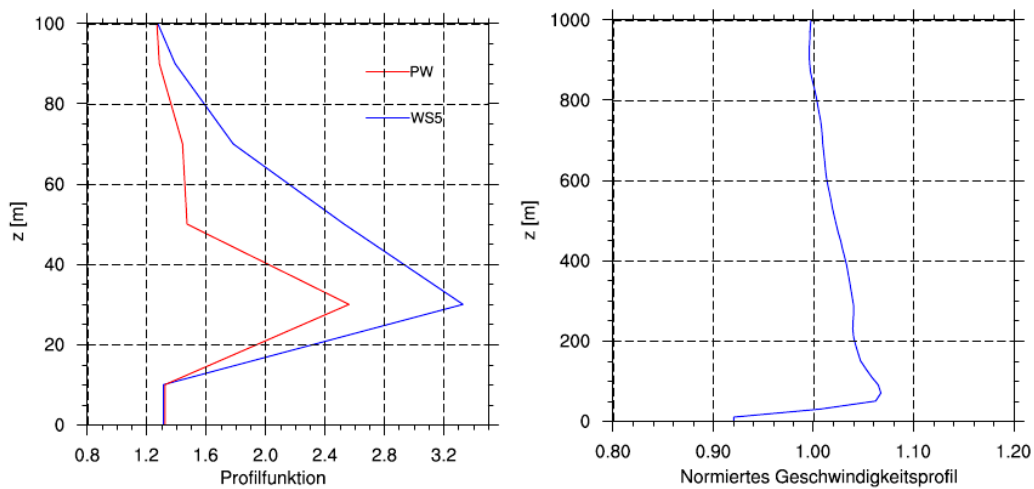


Abbildung 5.5: Profile abhängig von den Geisterrandwerten nach sechs Stunden für eine neutrale Grenzschicht mit $u_g = 10 \frac{m}{s}$, $v_g = 0 \frac{m}{s}$ und $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 20$ m. Der Mittelungszeitraum beträgt 1800 s. Auf der linken Seite ist $\phi_m = \frac{\partial |\bar{v}|}{\partial z} \frac{\kappa' z}{u_*}$ abhängig von der Höhe aufgetragen. Die blaue Linie zeigt die Profilkfunktion mit WS5, die rote Linie die Profilkfunktion mit PW. Die rechte Seite zeigt ein Profil der horizontalen Geschwindigkeit, welches mit einem Profil aus einer Referenzsimulation mit PW normiert ist.

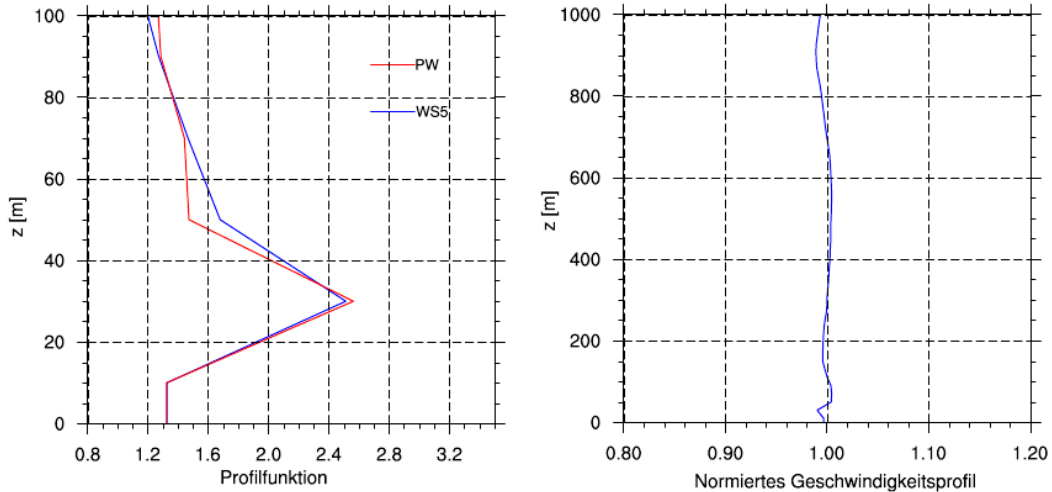


Abbildung 5.6: Normierte Profilkfunktion (linke Seite) und normiertes Geschwindigkeitsprofil (rechte Seite) unabhängig von den Geisterrandwerten.

de Beziehung für den Betrag der mittleren Horizontalgeschwindigkeit

$$\frac{\partial |\overline{v}|}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa' z} \phi_m \left(\frac{z}{L} \right) \quad (5.1)$$

benutzt wird. u_* ergibt sich aus einer Integration über z und wird als Schubspannungsgeschwindigkeit bezeichnet. L ist die Monin-Obukhov-Länge und $k' = 0.4$ steht für die Kármánsche Konstante. ϕ_m bezeichnet die Profilkfunktion, welche im neutralen Fall einen konstanten Wert von Eins aufweist. Auf der linken Seite in Abbildung 5.5 ist die Normierung von $\frac{\partial |\overline{v}|}{\partial z}$ mit $\frac{u_*}{\kappa' z}$ für eine neutrale Schichtung bei einem geostrophischen Wind von $u_g = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $v_g = 0 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ zu sehen. Mit beiden Schemen weichen die Profile in der Prandtl-Schicht von dem theoretischen Wert Eins und somit von dem logarithmischen Windprofil ab. Größere Unterschiede mit WS5 in den Gitterebenen $k = 2$, $k = 3$ und $k = 4$ weisen darauf hin, dass der Einfluss der im Boden liegenden Geisterrandwerte stärker als erwartet ist. Auf der rechten Seite von Abbildung 5.5 ist das Profil der horizontalen Geschwindigkeit, normiert mit dem Profil einer Referenzsimulation mit PW, zu sehen. Windprofile können durch weitere Effekte beeinflusst werden und es ist nicht garantiert, dass die Referenzsimulation mit PW reale Windprofile liefert. Jedoch sind die Abweichungen von bis zu 7% ein weiteres Indiz für eine Geisterrandabhängigkeit. Des Weiteren ist der Einfluss nicht nur auf bodennahe Bereiche beschränkt, sondern auch in größeren Höhen gegeben. Einen weiteren Hinweis auf die Abhängigkeit der Strömung von den Randwerten geben bodennahe Auffälligkeiten in den vertikalen Profilen turbulenter Größen. Diese variieren in ihrer Stärke abhängig von der Realisierung der Spiegelungsrandbedingung. Die Geisterrandwerte besitzen einen Einfluss, sind aber nicht die Ursache dieses Phänomens. In Abschnitt 5.3 wird darauf näher eingegangen.

Um einen Einfluss von unphysikalischen Randwerten auf die Simulation zu vermeiden, wird am oberen und unteren Rand sukzessive zu Verfahren niedrigerer Ordnung übergegangen. Die vertikalen Flüsse $F_{k+\frac{1}{2}}$ werden nun bei $k = 2$ mit WS3 und bei

$k = 1$ mit einem Schema zweiter Ordnung berechnet. Es zeigen sich starke Abhängigkeiten von der Wahl dieses Schemas. PW basiert, wie bereits erwähnt, auf einer schiefssymmetrischen Formulierung und berechnet daher keine Flüsse an den Rändern der Gitterboxen. Damit ist PW nicht konsistent zu den Schemen von Wicker und Skamarock (2002) und es treten bodennah unrealistisch hohe Windgeschwindigkeiten und Instabilitäten auf. Daher wird für den vertikalen Fluss in der Gitterebene $k = 1$ folgende Diskretisierung zweiter Ordnung verwendet:

$$F_{k+\frac{1}{2}}^2 = \frac{w_{k+\frac{1}{2}}}{2} [\psi_{k+1} + \psi_k] + F_{k+\frac{1}{2}}^{Diss}. \quad (5.2)$$

Dazu wird ein Fluss zweiter Ordnung mit einem auf Shchepetkin und McWilliams (1998) basierenden, modifizierten dissipativen Fluss $F_{k+\frac{1}{2}}^{Diss}$ kombiniert. Für diesen numerisch diffusiven Fluss werden zunächst die in der direkten Umgebung liegenden Maximal- und Minimalwerte bestimmt

$$\psi_k^{max} = \max(\psi_{k+1}, \psi_k, \psi_{k-1}) \quad (5.3)$$

$$\psi_k^{min} = \min(\psi_{k+1}, \psi_k, \psi_{k-1}). \quad (5.4)$$

Anschließend wird daraus ein Maß für die Fluktuation

$$\lambda_k = \max(0, \psi_k - \psi_k^{max}) + \min(0, \psi_k - \psi_k^{min}) \quad (5.5)$$

abgeleitet, aus dem der endgültige dissipative Fluss folgendermaßen bestimmt wird:

$$F_{k+\frac{1}{2}}^{Diss} = \frac{|w_{k+\frac{1}{2}}|}{2} [\lambda_{k+1} - 2\lambda_k + \lambda_{k-1}]. \quad (5.6)$$

Dieser ähnelt einer Diskretisierung des physikalischen Diffusionsterms zweiter Ordnung und ist notwendig um unrealistisch hohe Windgeschwindigkeiten zu vermeiden. Damit die numerische Lösung an der Ober- und Untergrenze des Modellgebiets unabhängig von den Geisterrandwerten bleibt, gehen in die Berechnung der Werte λ_k und λ_{k-1} keine Randwerte ein.

Die in Abbildung 5.6 dargestellte normierte Profilkfunktion und das Geschwindigkeitsprofil für die am Boden modifizierte Vertikaladvektion zeigen geringere Abweichungen verglichen mit der vorherigen Version. Die Profilkfunktion und damit das bodennahe Windprofil stimmen allerdings immer noch nicht mit den Prandtl-Schicht Beziehungen überein. Da die im Subskalenmodell verwendete Annahme der Isotropie kleiner Skalen in Bodennähe nicht erfüllt ist und sich kohärente Strukturen ausbilden, kann dieser Bereich nicht richtig modelliert werden (Drikakis, 2003). Infolgedessen ist es mit LES schwierig, Geschwindigkeitsprofile in der Nähe fester Berandungen entsprechend zu beschreiben (Fröhlich, 2006).

Der schrittweise Übergang zu Verfahren niedrigerer Ordnung an den Rändern führt zu größeren Diskretisierungsfehlern verglichen mit der Diskretisierung im restlichen Modellgebiet. Infolge der physikalischen und numerischen Dissipation wirken die zusätzlichen Diskretisierungsfehler allerdings nur lokal und sind vernachlässigbar, da die Strömung in diesen Bereichen ohnehin schlecht aufgelöst ist.

Wie in Abschnitt 2.5.1 beschrieben, besteht mit **PALM** die Möglichkeit das Gitter vertikal ab einer vorgegebenen Höhe zu strecken. Da WS5 mehr Gitterpunkte

für die Berechnung der Advektionsterme benötigt, wird ein deutlich größerer Fehler durch die Streckung verursacht als es mit PW der Fall ist. In den in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen mit gestreckten Gittern traten keine Auffälligkeiten diesbezüglich auf. Um dennoch eventuelle Einflüsse zu minimieren, wird empfohlen den Streckungsfaktor f_{stretch} so gering wie möglich zu wählen.

5.3 Statistische Auswertung turbulenter Flüsse

In einer divergenzfreien Strömung beschreiben die Advektionsterme in den Modellgleichungen den Transport einer Größe durch eine andere Größe. Infolge einer zeitlichen Reynolds-Mittelung kann der mittlere Transport in einen durch die mittlere Strömung hervorgerufenen und einen turbulenten Anteil

$$\overline{\frac{\partial u_k u_i}{\partial x_k}} = \frac{\partial \bar{u}_k \bar{u}_i}{\partial x_k} + \overline{\frac{\partial u'_k u'_i}{\partial x_k}}, \quad (5.7)$$

$$\overline{\frac{\partial u_k \theta_l}{\partial x_k}} = \frac{\partial \bar{u}_k \bar{\theta}_l}{\partial x_k} + \overline{\frac{\partial u'_k \theta'_l}{\partial x_k}}, \quad (5.8)$$

$$\overline{\frac{\partial u_k s}{\partial x_k}} = \frac{\partial \bar{u}_k \bar{s}}{\partial x_k} + \overline{\frac{\partial u'_k s'}{\partial x_k}} \quad (5.9)$$

aufgespalten werden. Die einzelnen Terme stellen Flussdivergenzen dar und die darin enthaltenen Produkte können als Flüsse oder auch als Varianzen bzw. Kovarianzen interpretiert werden. In den ersten Simulationen für eine atmosphärische Grenzschicht unter Verwendung von WS5 hat sich gezeigt, dass die bisher in **PALM** eingesetzte statistische Auswertemethode der turbulenten Anteile als Varianzen und Kovarianzen

$$\overline{u'_k u'_i} = (u_k - \bar{u}_k)(u_i - \bar{u}_i), \quad (5.10)$$

$$\overline{u'_k \theta'_l} = (u_k - \bar{u}_k)(\theta_l - \bar{\theta}_l), \quad (5.11)$$

$$\overline{u'_k s'} = (u_k - \bar{u}_k)(s - \bar{s}) \quad (5.12)$$

zu auffälligen Knicken in den bodennahen Vertikalprofilen führte. Die Knicke sind in Abbildung 5.7 exemplarisch anhand des totalen vertikalen Temperatur- und Impulsflusses für die u -Komponente dargestellt. Der große Vertikalgradient und der Vorzeichenwechsel im Bereich der Knicke würden auf vertikal entgegengesetzt gerichtete Flüsse hindeuten. So würde im unteren Teil des Knicks Impuls vom Boden weg in die Höhe transportiert werden und die dazugehörige Geschwindigkeit würde sich dort im Mittel verringern. Im Fall des Temperaturflusses würde dagegen im Mittel Wärme² in Richtung Heizfläche transportiert werden, was eine relative Abkühlung oberhalb und eine relative Erwärmung unterhalb des Knicks zur Folge hätte. Anfänglich wurde vermutet, dass die Geosterrandwerte verantwortlich für diese Auffälligkeiten seien, da die Form der Knicke in den Impulsflüssen von den Werten der unteren Geosterränder abhing. Es zeigte sich jedoch infolge der Beseitigung des Geosterrandeinflusses (siehe Abschnitt 5.2), dass zwar eine gewisse Abhängigkeit bestand, diese jedoch nicht die

²Der mit $c_p \rho$ multiplizierte Temperaturfluss entspricht einem Wärmefluss.

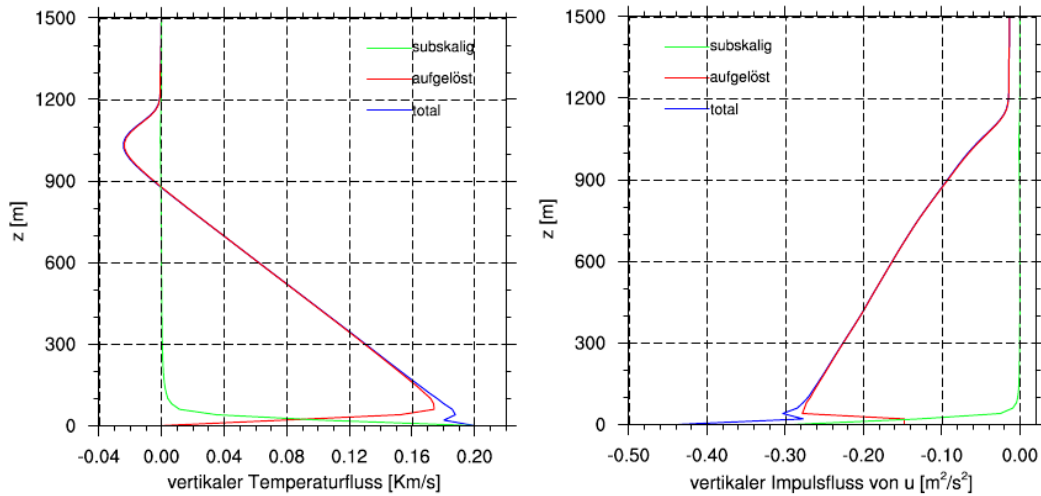


Abbildung 5.7: Horizontal und zeitlich über 1800s gemittelte Profile der aufgelösten, subskaligen und totalen Anteile des Temperatur- (linke Seite) und Impulsflusses für die u -Komponente der Geschwindigkeit (rechte Seite) nach fünf Stunden Simulationszeit. Die hier abgebildeten aufgelösten Anteile turbulenter Flüsse stellen nach der Berechnungsmethode Kovarianzen dar. Zu beachten ist der bodennahe Knick in den totalen Flüssen. Die verwendete Gitterweite liegt bei $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 20$ m. Der vorgegebene Wert des Temperaturflusses am Boden beträgt $0.2 \frac{\text{Km}}{\text{s}}$, bei einem geostrophischen Windes von $u_g = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $v_g = 0 \frac{\text{m}}{\text{s}}$.

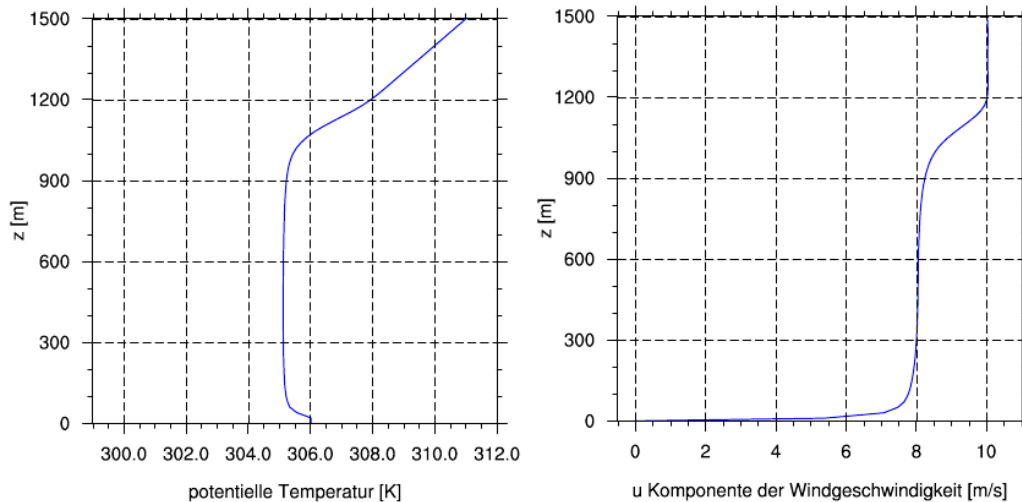


Abbildung 5.8: Vertikale Profile der potentiellen Temperatur und der u -Komponente der Geschwindigkeit.

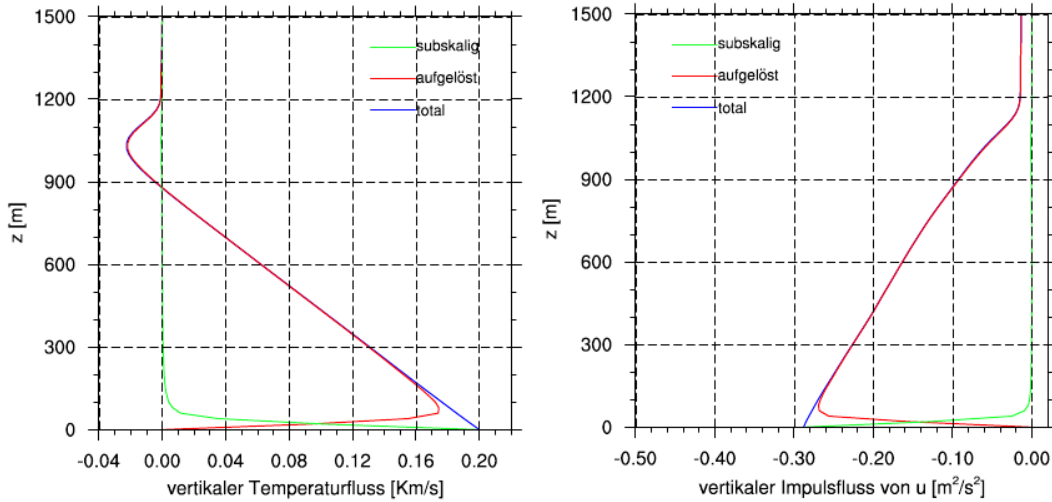


Abbildung 5.9: Vertikale Profile des Temperatur- und Impulsflusses. Die Berechnungsmethode entspricht der eines Flusses.

Ursache der Auffälligkeiten darstellte.

Die zu den vertikalen Flüssen zugehörigen Vertikalprofile der Geschwindigkeitskomponente u und der potentiellen Temperatur in Abbildung 5.8 zeigen allerdings keine derartigen Auffälligkeiten im Bereich der Knicke. Gleiches gilt auch für die subskaligen und aufgelösten Anteile in Abbildung 5.7. Aus diesem Grund kann davon ausgegangen werden, dass es sich hierbei um ein Auswerteproblem bei der Berechnung statistischer Größen handelt und nicht um ein Problem mit dem Advektionsverfahren selber.

Subskalige Anteile werden nach einem Gradientansatz (2.29)-(2.31) berechnet und werden somit in gleicher Weise behandelt wie in den prognostischen Gleichungen. Im Fall von WS5 ist die Berechnungsmethode der turbulenten Größen vollständig von der Diskretisierung der Advektionsterme entkoppelt. Dadurch sind die subskaligen und aufgelösten Anteile bei der Auswertung nicht konsistent zueinander, was sich besonders in Bodennähe durch die nicht vernachlässigbaren subskaligen Flüsse in Form der beschriebenen Knicke äußert. Mit PW werden zwar keine reinen Flussdivergenzen berechnet, jedoch ähnelt die Diskretisierung der Berechnung von aufgelösten Flüssen. Dies ist vermutlich der Grund weshalb die Auffälligkeiten mit PW nicht auftreten.

Für eine zu der Diskretisierung konsistenten Berechnung turbulenter Größen ist es erforderlich, diese nicht als Varianzen und Kovarianzen, sondern als reine Flüsse zu interpretieren. Die numerischen Flüsse in WS5 sind nur von Ableitungen der Größen abhängig, nicht von den absoluten Werten. Bei der Anwendung der Prädiktor-Korrektor Methode wird sichergestellt, dass die Vertikalgeschwindigkeit im horizontalen Mittel Null ist. Infolgedessen werden durch die mittlere Vertikaladvektion nur turbulente Flüsse beschrieben. Dadurch können die in den Advektionsunterprogrammen berechneten vertikalen numerischen Flüsse zwischengespeichert und direkt für die Auswertung aufgelöster turbulenter Größen herangezogen werden. Für horizontale turbulente Flüsse wird der Einfluss des mittleren Horizontalwindes sowie der

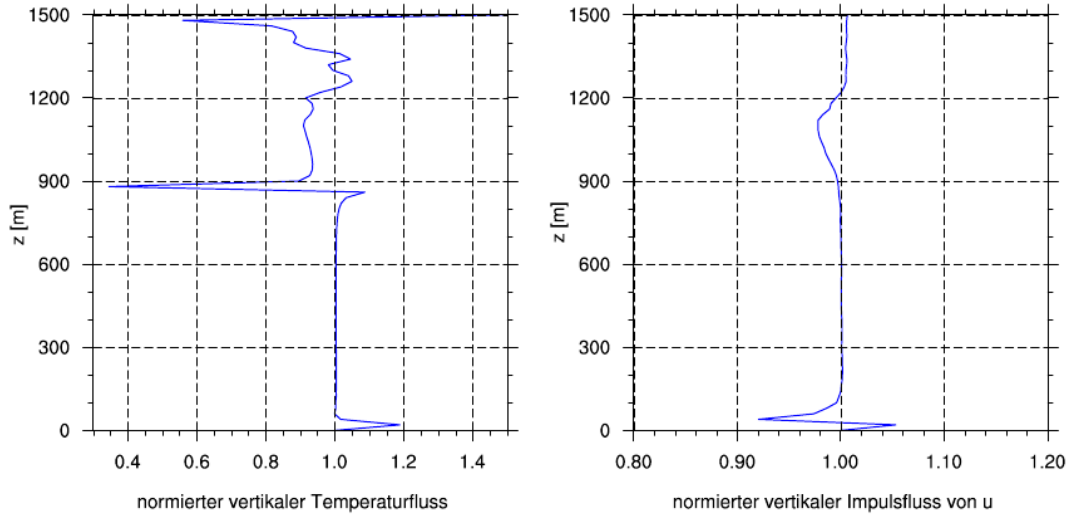


Abbildung 5.10: Als Flüsse berechnete vertikale Profile des aufgelösten Temperatur- und Impulsflusses, normiert mit den als Kovarianzen berechneten Profilen.

Galilei-Transformation durch Multiplikation der numerischen Flüsse $F_{i+\frac{1}{2}}$ mit einem Faktor

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2}} - 2\bar{u}}{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i,\text{Galilei}}} \quad (5.13)$$

beseitigt. \bar{u} bezeichnet dabei das horizontale Mittel der Geschwindigkeitskomponente. Weiterhin zeigen die Profile eine geringe Abhängigkeit von der Wahl des RK3^{PALM}-Teilschrittes, welche durch die unterschiedliche Wichtung der Flüsse mit RK3^{PALM} bedingt ist. Aus diesem Grund gehen die zu allen Teilzeitschritten berechneten Flüsse mit den entsprechenden Wichtungsfaktoren $\beta_{4,1}$, $\beta_{4,2}$, $\beta_{4,3}$ (siehe Abschnitt 2.5.2) in die Statistik ein.

Mit der modifizierten Auswertung treten keine Auffälligkeiten mehr auf, wie in Abbildung 5.9 zu sehen ist. Es zeigt sich, dass sich die modifizierte Auswertung turbulenter Größen von der Bisherigen vorwiegend in Bereichen unterscheidet, in denen die transportierten Größen große Gradienten aufweisen und subskalige Flüsse eine Rolle spielen. Da bei der Berechnung der Kovarianzen nur die Informationen aus zwei Gitterebenen (horizontale Geschwindigkeitskomponenten und skalare Größen werden auf das w -Gitter interpoliert) eingehen, werden dadurch nicht die tatsächlichen Werte berechnet, wie sie sich bei der zeitlichen Integration im Mittel ergeben. Dadurch dass sich subskalige und aufgelöste Anteile gegenseitig beeinflussen, sind diese aufeinander angepasst. Das ist im Fall der Kovarianzen nicht der Fall. Vor allem in Bodennähe und im Bereich der Entrainment-Zone zeigen sich die größten Unterschiede zwischen den Auswertemethoden, wie in Abbildung 5.10 verdeutlicht ist. Am Boden weichen die Werte für den Temperaturfluss um bis zu 20% ab, für den Impulsfluss um bis zu 8%. Am Übergang in den Entrainment-Bereich liefert die bisherige Auswertemethode um mehr als 60% höhere Werte für den Temperaturfluss. In der Inversion wird der Temperaturfluss um etwa 20%, der Impulsfluss immerhin noch um etwa 4%

überschätzt. Die großen Abweichungen zwischen den Auswertemethoden im Temperaturfluss oberhalb der Grenzschicht sind auf die geringen Absolutbeträge in diesem Bereich zurückzuführen.

Die geänderte Auswertemethode turbulenter Größen gilt nur in Verbindung mit WS5. Wird als Advektionsverfahren PW benutzt, bleibt die bisherige Auswertemethode turbulenter Größen bestehen.

5.4 Simulation einer trockenen neutralen Grenzschicht

Anhand der Simulation einer trockenen neutralen Grenzschicht sollen Erkenntnisse über die spektrale Verteilung und den in Abschnitt 3.3 erläuterten Zusammenhang zwischen Subskalenmodell und Diskretisierung gewonnen werden. Dadurch dass sich die neutrale Grenzschicht durch einen adiabatischen Temperaturgradienten und fehlende Auftriebskräfte auszeichnet, können diese Einflüsse einfacher quantifiziert werden. Dabei wird die TKE allein durch Geschwindigkeitsscherung produziert. Skalare Advektion spielt mit Ausnahme der subskaligen TKE bei der Simulation kaum eine Rolle. Aus diesem Grund kann diese Simulation als ein weiterer, jedoch wesentlich komplexerer Testfall für die Impulsadvektion angesehen werden. Für eine möglichst genaue Auflösung des Inertialbereichs beträgt die Gitterweite in allen Raumrichtungen 7 m, bei jeweils 384 Gitterpunkten. Die Rauigkeitslänge am Boden liegt bei 0.2 m. Das Koordinatensystem verlagert sich mit dem geostrophischen Wind $u_g = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $v_g = 0 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Der Mittelungszeitraum beträgt für alle folgenden statistischen Größen 1800 s.

In Abbildung 5.11 ist die mit der Wellenzahl vormultiplizierte eindimensionale spektrale Dichte der drei Geschwindigkeitskomponenten gegen die Wellenzahl für WS5 und PW aufgetragen. Dabei kann das Spektrum als räumliche Skala der Abweichung einer Größe vom horizontalen Mittel angesehen werden. Für sehr kleine Wellenzahlen ($\kappa \rightarrow 0$) liefern eindimensionale Spektren einen konstanten, von Null verschiedenen Wert. Da jedoch physikalisch keine Turbulenz auf Skalen gleich der Erstreckung des Modellgebiets produziert wird, entspricht dies nicht den tatsächlichen Eigenschaften der Strömung bei kleinen Wellenzahlen. Durch die Multiplikation der spektralen Dichte mit κ wird dies zum Teil verbessert. Allerdings werden dadurch die Maxima künstlich verbreitert und die Skalen, bei denen der Großteil der Turbulenz produziert wird, können nicht exakt wiedergegeben werden (Kelly und Wyngaard, 2006). Eindimensionale Spektren sind jedoch ausreichend, wenn wie in diesem Fall nur die durch die Diskretisierungsfehler beeinflussten kleinen Skalen bei hohen Wellenzahlen betrachtet werden. Die Abnahme der spektralen Dichten entspricht bei hohen Wellenzahlen mit beiden Schemen nicht dem $\kappa^{-\frac{5}{3}}$ -Gesetz von Kolmogorov (1941). Dies ist zum Teil auf den in Abschnitt 3.3 erläuterten Effekt der Dispersionsfehler und den damit verbundenen zusätzlichen Energietransfer zurückzuführen. Aufgrund der dominierenden numerischen Dissipation ist der mit geringeren Dispersionsfehlern verbundene, geringere Energietransfer mit WS5 bei hohen Wellenzahlen in den Spektren kaum zu erkennen. Die numerische Dissipation verringert zusätzlich die effektive Filterweite (siehe Abschnitt 3.3), sodass die spektralen Dichten mit WS5 schon bei kleineren Wellenzahl stärker abnehmen und zum Teil um bis zu zwei Größenordnun-

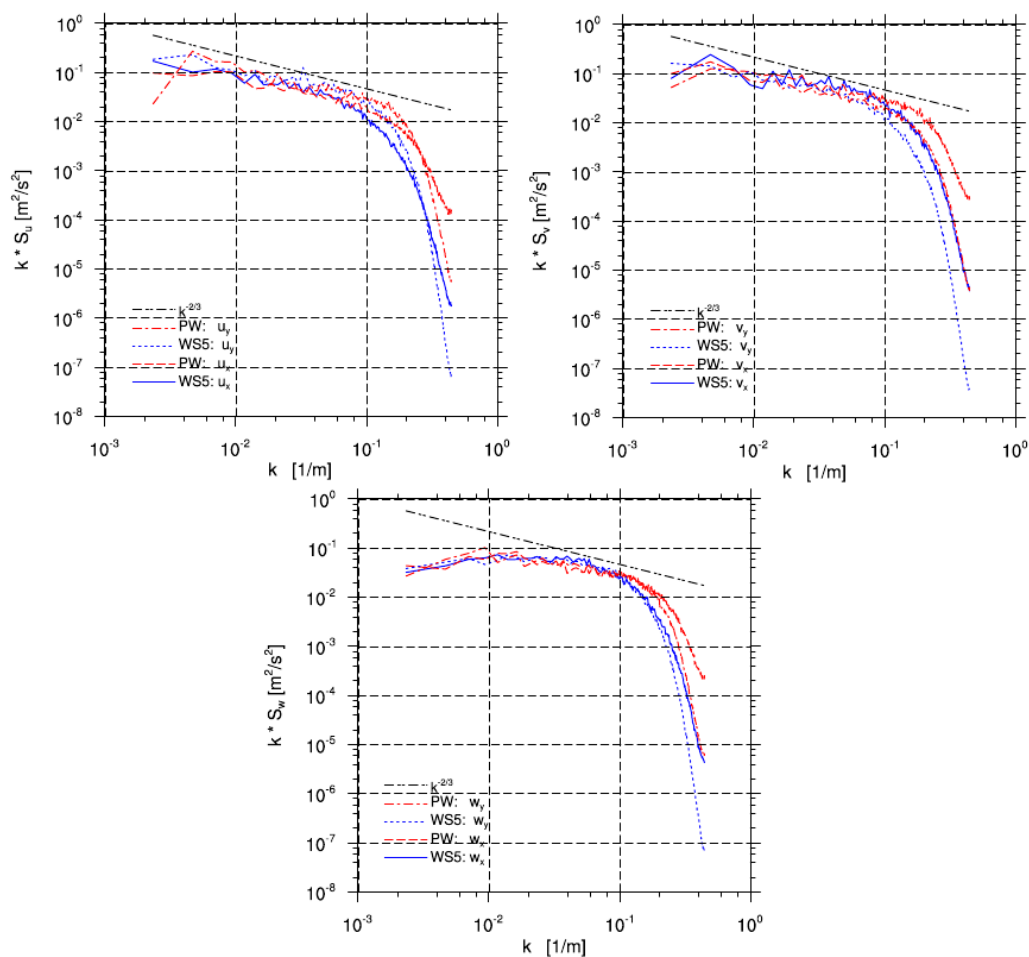


Abbildung 5.11: Spektrale Dichten nach sechs Stunden Simulationszeit für u (linke obere Seite), v (rechte obere Seite) und w (unten) in x - und y -Richtung bei $z = 500.5 \text{ m}$. Der Mittelungszeitraum beträgt 1800 s . Die schwarz gestrichelte Gerade verdeutlicht den nach der Turbulenztheorie erwarteten Verlauf der mit der Wellenzahl multiplizierten spektralen Dichte gemäß $\kappa^{-\frac{2}{3}}$.

5.4 Simulation einer trockenen neutralen Grenzschicht

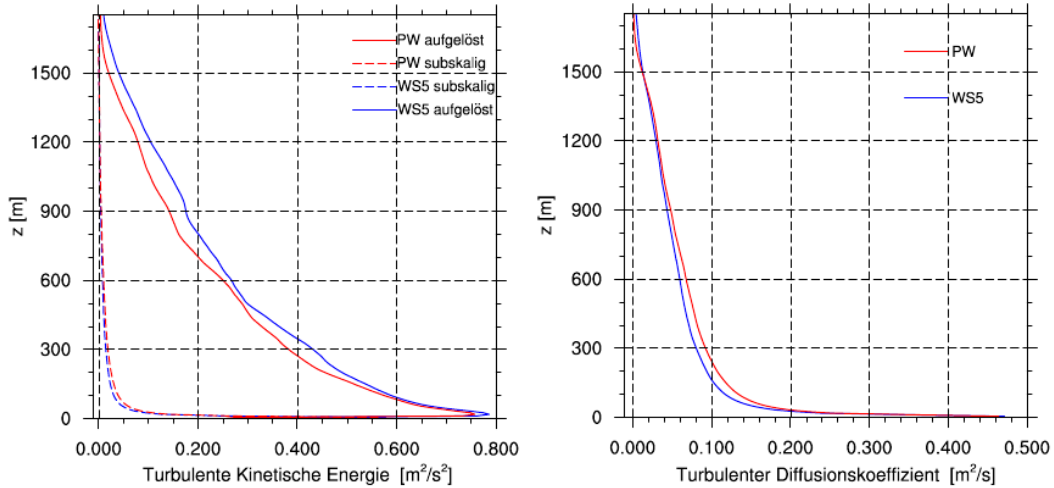


Abbildung 5.12: Profile der aufgelösten und subskaligen TKE (linke Seite) sowie des turbulenten Diffusionskoeffizienten für Impuls (rechte Seite) mit WS5 und PW.

gen geringere Werte aufweisen. Bei kleineren Wellenzahlen weist die spektrale Dichte mit WS5 zum Teil leicht höhere Werte auf. Im Bereich der Abschneidelänge $\frac{\pi}{\Delta x_i}$ fällt teilweise ein leichtes Anwachsen der spektralen Dichten mit PW auf. Dies resultiert daraus, dass 2Δ -Strukturen nicht ausreichend dissipiert werden und die Strömung überlagern. Abbildung 5.12 zeigt Profile der aufgelösten und subskaligen TKE sowie des turbulenten Diffusionskoeffizienten. Darin ist zu erkennen, dass bei der Simulation mit WS5 die aufgelöste TKE im horizontalen Mittel höhere Werte im Vergleich zu PW annimmt. Dies ist vor allem durch die unterschiedlichen Beiträge der Dispersionsfehler zum Energietransfer bedingt. Wie schon mehrfach erwähnt, zerfallen Wirbel mit PW schneller in kleinere und dadurch energieärmere Wirbel. Durch den geringen Beitrag der kleinen Wirbel zum horizontalen Mittel spielt der dissipative Effekt bei WS5 dabei eine untergeordnete Rolle. In Bodennähe verringern sich mit WS5 die subskalige TKE und der damit verbundene turbulente Diffusionskoeffizient mit zunehmender Höhe stärker als mit PW und weisen auch in größeren Höhen geringere Werte auf. Da die Mischungsweglänge (2.32) bei neutraler Schichtung nicht von der subskaligen TKE, sondern nur von der charakteristischen Gitterweite und dem Abstand zum Boden abhängt, sind die unterschiedlichen Profilwerte darüber nicht zu erklären. Jedoch ist die subskalige TKE über die prognostische Gleichung dem Einfluss von Diskretisierungsfehlern ausgesetzt. Verbunden mit der geringeren spektralen Dichte und der damit verbundenen geringeren Abweichungen auf kleinen Skalen, wird mit WS5 weniger subskalige TKE durch Scherung von Geschwindigkeitskomponenten produziert. Die Produktion und Dissipation ist lokal begrenzt, wodurch keine größerskaligen Strukturen in der subskaligen TKE auftreten (Conzemius und Fedorovich, 2006a). Bedingt durch die damit verbundenen hohen Wellenzahlen der subskaligen TKE, ist damit ein Einfluss der numerischen Dissipation bei der Prognose subskaliger TKE im Fall von WS5 gegeben. Entsprechend werden die lokalen Gradienten der subskaligen TKE geglättet, wodurch wiederum die Produktion durch die Parametrisierung subskaliger Druckschwankungen und molekulare Diffusion subskaliger TKE beeinflusst wird. Auf-

grund des größeren numerischen Energietransfers mit PW sind größere Abweichungen und Scherungen auf kleinen Skalen vorhanden, sodass darüber mehr subskalige TKE produziert wird. Der Diffusionskoeffizient ist denselben Einflüssen wie die subskalige TKE ausgesetzt, wodurch sich die Unterschiede äquivalent erklären lassen. Der Einfluss der numerischen Dissipation auf die subskalige TKE ist jedoch aufgrund des rückkoppelnden Mechanismus über die physikalische Dissipation begrenzt. Diese wird dadurch verringert, da ein Teil der Dissipation numerisch bereitgestellt wird.

Die physikalische Dissipation wird in **PALM** nur innerhalb des Subskalenmodells benötigt, wodurch ein weiterer Einfluss auf die Simulation nicht gegeben ist. Eine Ausnahme bildet jedoch das Lagrangesche Partikelmodell, welches die physikalische Dissipation für die Parametrisierung subskaliger Partikelgeschwindigkeiten verwendet. Dieser, wie auch die genauen Effekte und Zusammenhänge zwischen den Abbruchfehlern auf die einzelnen Produktionsterme der subskaligen TKE müssen noch gründlicher quantifiziert werden um weitere Schlüsse ziehen zu können.

Werden die mit **PALM** zu untersuchenden Phänomene ausreichend durch das Gitter aufgelöst, ist kein Einfluss der numerischen Dissipation auf das Simulationsergebnis zu erwarten. Eine Ausnahme bilden feste Berandungen und Bereiche in denen Strukturen nicht gut aufgelöst sind, wie zum Beispiel in der Entrainment-Zone. Dort verringert sich die Wirbelgröße soweit, dass eine effektive Filterung durch numerische Fehler stattfindet. Im Fall von WS5 dominiert in diesen Fall der Dissipationsfehler und kleine Skalen werden zusätzlich gedämpft, sodass eine entsprechend angepasste Dissipationskontrolle vermutlich zu einer verbesserten effektiven Auflösung in diesen Bereichen führen würde, wie im nächsten Abschnitt angedeutet wird.

5.5 Simulation einer trockenen konvektiven Grenzschicht

Eine konvektive Grenzschicht besteht aus einer gut durchmischten Schicht (Mischungsschicht), die sich oberhalb einer bodennahen Prandtl-Schicht und unterhalb einer abgehobenen Inversion befindet. Oberhalb der Inversion befindet sich eine absinkende freie Atmosphäre. In einer konvektiven Grenzschicht wird die TKE vorwiegend durch Auftriebskräfte und zu geringeren Teilen durch Scherung produziert. Advektionsprozesse spielen dabei in der Mischungsschicht und der Entrainment-Zone eine entscheidende Rolle (Kraus, 2008).

Für eine Untersuchung der sich daraus ergebenden Abhängigkeiten vom verwendeten Advektionsschema, wird eine konvektive Grenzschicht für ein Modellgebiet mit $256 \times 256 \times 128$ Gitterpunkten bei einer Gitterweite von $\Delta x_i = 15 \text{ m}$ über einen Zeitraum von 5 Stunden simuliert. Das Koordinatensystem verlagert sich mit dem geostrophischen Wind $u_g = 5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $v_g = 0 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Der Temperaturfluss am Boden beträgt $\overline{w'\theta'} = 0.1 \frac{\text{Km}}{\text{s}}$. Zu Beginn der Simulation ist die Atmosphäre bis 470 m neutral geschichtet. Oberhalb einer 100 m dicken Inversion, mit einem Temperaturgradienten von $10 \frac{\text{K}}{100 \text{ m}}$, schließt sich die freie Atmosphäre mit einem Temperaturgradienten von $0.3 \frac{\text{K}}{100 \text{ m}}$ an. Da die skalare Advektion für die Simulation einer konvektiven Grenzschicht von großer Bedeutung ist, wird zusätzlich zu dem Vergleich zwischen WS5 und PW der Einfluss der Dissipationskontrolle D3 auf die Simulationsergebnisse disku-

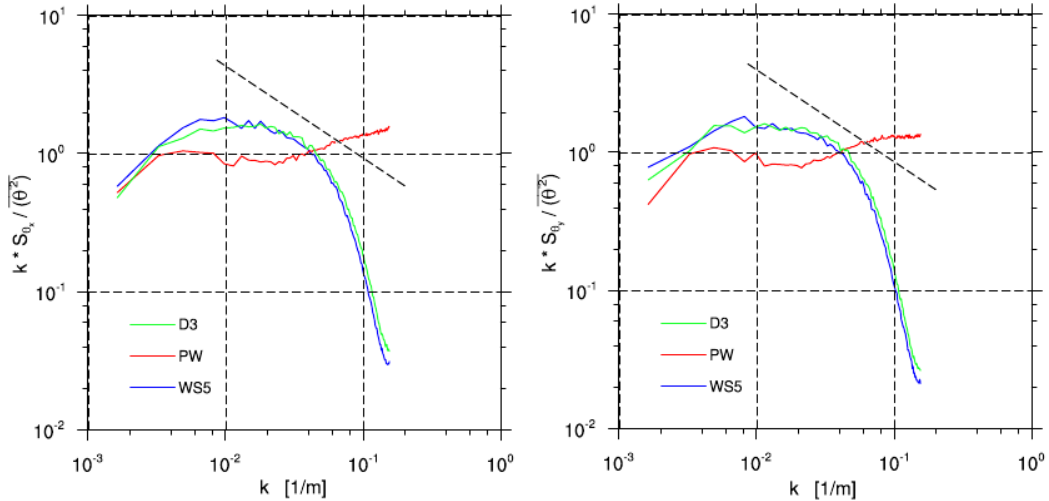


Abbildung 5.13: Mit der Wellenzahl vormultiplizierte spektrale Dichte der potentiellen Temperatur in x- (linke Seite) sowie y-Richtung (rechte Seite), normiert mit der Varianz der potentiellen Temperatur, in der Höhe der Inversion ($z = 550$ m) nach 5 Stunden Simulationszeit. Der Mittelungszeitraum beträgt 1000 s. Die schwarz gestrichelte Linie kennzeichnet den $\kappa^{-\frac{2}{3}}$ Verlauf.

tiert. Um die Wechselwirkungen zwischen Dissipationskontrolle und Subskalenmodell überschaubar zu halten, wird diese nur in der prognostischen Gleichung der potentiellen Temperatur verwendet, nicht für die prognostische Gleichung der subskaligen TKE. Abbildung 5.13 zeigt die spektrale Dichte der potentiellen Temperatur in Höhe der Inversion, normiert mit der Varianz der potentiellen Temperatur. Es sind keine signifikanten Unterschiede der spektralen Dichte in x- bzw. y-Richtung erkennbar. Der Beitrag größerer Skalen an der Varianz der potentiellen Temperatur ist mit PW geringer als bei WS5 und D3. Dies kann wieder auf den zusätzlichen Energietransfer durch Dispersionsfehler zurückgeführt werden. Da in der Parametrisierung der physikalischen Dissipation eine Abhängigkeit von der Mischungsweglänge (2.32) existiert, diese aber bei stabiler Schichtung den eigentlichen Temperaturgradienten überhaupt nicht berücksichtigt, wird nicht genügend physikalische Dissipation bereitgestellt. Aus diesem Grund werden kleinskalige Strukturen nicht dissipiert, was im Fall von PW zu einer erhöhten spektralen Dichte bei hohen Wellenzahlen führt. Durch die in WS5 enthaltene numerische Dissipation werden kleine Skalen auch bei stabiler Schichtung gedämpft. Wie auch im neutralen Fall, nimmt die vormultiplizierte spektrale Dichte mit WS5 stärker ab als mit $\kappa^{-\frac{2}{3}}$. Aufgrund der hohen Varianz der potentiellen Temperatur in der Entrainment-Zone sind die Unterschiede der in D3 enthaltenen lokalen Varianz zu der Globalen vermutlich zu gering. Infolgedessen ist die numerische Dissipation ähnlich der von WS5 und es ist kaum ein Unterschied in der Abnahme der spektralen Dichte zwischen WS5 und D3 erkennbar. Die absoluten Werte sind jedoch mit D3 bei hohen Wellenzahlen etwas höher. Bei kleineren Wellenzahlen ist eine leichte Veränderung der spektralen Dichte durch die modifizierten Dispersions-eigenschaften (siehe Abschnitt 3.4) zu beobachten. Genaue Schlüsse sollten aufgrund der in Abschnitt 5.4 erläuterten Nachteile eindimensionaler Spektren bei kleineren

5.5 Simulation einer trockenen konvektiven Grenzschicht

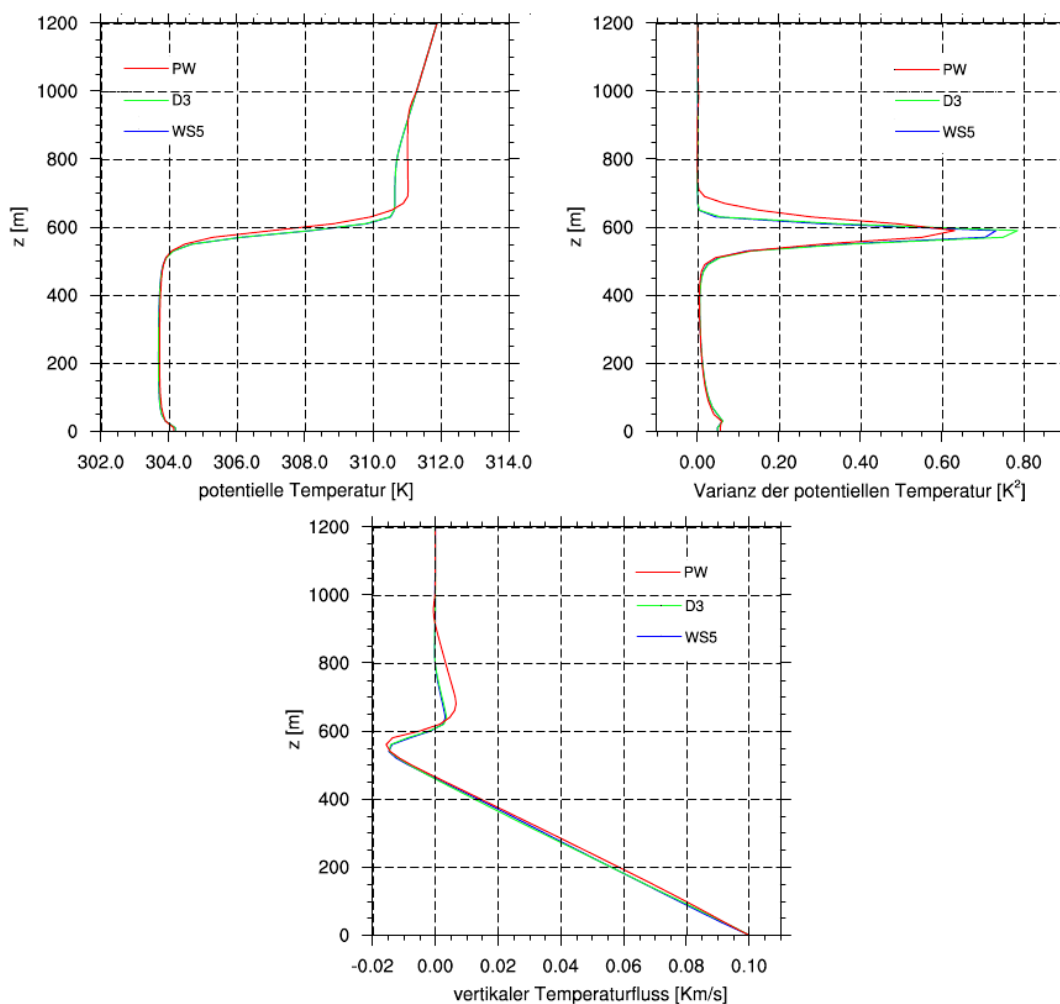


Abbildung 5.14: Über 1000 s gemittelte Profile der potentiellen Temperatur (linke obere Seite), der Varianz der potentiellen Temperatur (rechte obere Seite) sowie des vertikalen Temperaturflusses (unten) nach 5 Stunden Simulationszeit.

5.5 Simulation einer trockenen konvektiven Grenzschicht

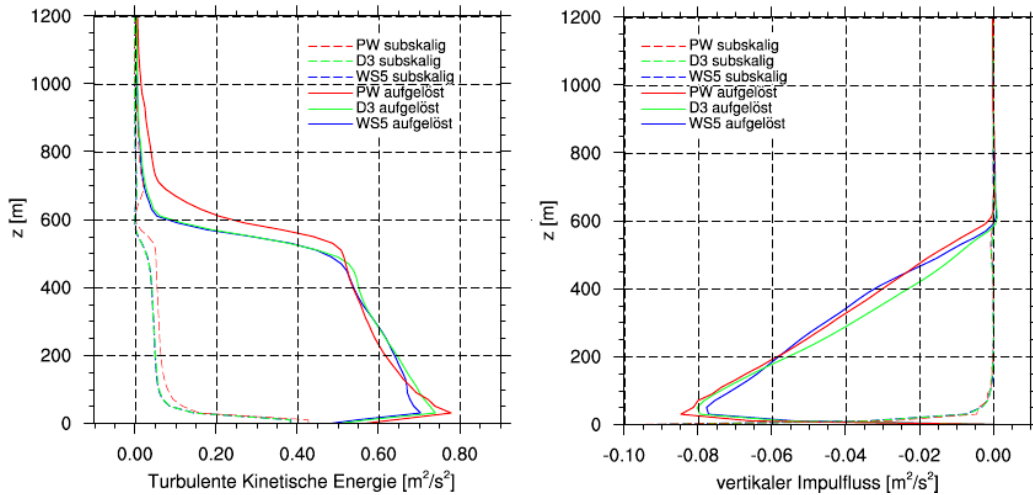


Abbildung 5.15: Über 1000 s gemittelte Profile der aufgelösten und subskaligen Anteile der TKE (linke Seite) und des vertikalen Impulsflusses für die u -Komponente der Geschwindigkeit (rechte Seite).

Wellenzahlen nicht gezogen werden. Dennoch ist zu vermuten, dass die leichten Unterschiede der spektralen Dichte zwischen D3 und WS5 bei kleineren Wellenzahlen auf die modifizierten Dispersionseigenschaften zurückgeführt werden können.

In den Vertikalprofilen der potentiellen Temperatur und des vertikalen Temperaturflusses in Abbildung 5.5 ist zu erkennen, dass die Inversion mit PW etwas mächtiger ist als mit WS5 und D3. Oberhalb der Inversion schließt sich eine Schicht mit einem geringeren Temperaturgradienten an. Diese Schicht ist mit PW dicker und wärmer als mit WS5 und D3. In Übereinstimmung dazu ist der vertikale Temperaturfluss in diesem Bereich mit PW höher. Otte und Wyngaard (2001) führen diesen Verlauf der potentiellen Temperatur oberhalb der Inversion in ihren Betrachtungen auf numerische Oszillationen zurück. Die Luftpakete aus der Grenzschicht können zum Teil bis über die Inversion hinausschießen, ehe sie durch negative Auftriebskräfte in der stabilen Schichtung vollständig abgebremst werden. Infolge großer Temperaturgradienten zwischen den aufsteigenden Luftpaketen und warmer Luft in und oberhalb der Inversion, entstehen starke numerische Oszillationen, die wie beschrieben im Fall von PW nicht ausreichend dissipiert werden. Dadurch werden oberhalb der Inversion lokal große Temperaturgradienten erzeugt, die im horizontalen Mittel zu einer Durchmischung dieser Schicht führen und einen erhöhten Wärmestrom verursachen. Eine höhere Varianz der potentiellen Temperatur und eine höhere TKE mit PW oberhalb der Inversion unterstützen diese Vermutung. Innerhalb der Inversion ist die Varianz mit PW geringer im Vergleich zu D3 und WS5, da die größerskaligen Anteile mit PW sehr stark dispergieren. D3 weist eine etwas größer Varianz gegenüber WS5 innerhalb der Inversion auf. Die subskaligen und aufgelösten Anteile der TKE sind in Abbildung 5.15 dargestellt. In und oberhalb der Inversion ist aufgrund der ungenügenden Dissipation die TKE mit PW höher. Der unterschiedliche Verlauf der Vertikalprofile in der Entrainment-Zone zwischen WS5 und PW stimmt demnach mit der Behauptung von Stevens et al. (1999) überein, dass Simulationsergebnisse in diesem Bereich

explizit von der Wahl des Advektionsverfahrens abhängen.

Im Gegensatz zu den Ergebnissen einer neutralen Grenzschicht ist die TKE mit PW bodennah höher als mit WS5. Die auf die potentielle Temperatur angewandte Dissipationskontrolle beeinflusst über den Auftriebsterm in den Bewegungsgleichungen die TKE, welche in Bodennähe und unterhalb der Inversion mit D3 im horizontalen Mittel höher ist als mit WS5. Auch der vertikale Impulsfluss in Abbildung 5.15 zeigt eine Abhängigkeit vom verwendeten Advektionsschema.

Um die Zusammenhänge zwischen turbulenten Flüssen und Advektionsverfahren in der Mischungsschicht sowie der Entrainment-Zone genauer quantifizieren zu können, sind deutlich höher aufgelöste Simulationen und detaillierte Untersuchungen der Produktionsterme der aufgelösten TKE notwendig. Des Weiteren ist für eine genauere Analyse des Einflusses der numerischen Dissipationskontrolle eine Parameterstudie des in D3 enthaltenen Parameters C_{Diss} notwendig, damit numerische Oszillationen besser von turbulenten Fluktuationen unterschieden werden können.

5.6 Modellvergleich - BOMEX

Für eine Validierung von WS5 wird der **BOMEX**-Fall (**B**arbados **O**ceanographic and **M**eteorological **E**xperiment) ausgewählt, welcher bereits in einer LES-Vergleichsstudie untersucht wurde (Siebesma et al., 2003). Für diese Vergleichsstudie liegt ein Datensatz vor, sodass ein qualitativer Vergleich mit anderen LES-Modellen möglich ist. Es wird eine für die Passatregion typische Grenzschicht über 6 Stunden simuliert, die mit flachen Cumuluswolken bedeckt ist. Horizontale Druckgradienten ändern sich mit der Höhe. Die Gitterweite beträgt 100 m in x- und y-Richtung sowie 40 m in z-Richtung bei 64 x 64 x 80 Gitterpunkten. Um ein Anwachsen der Grenzschichthöhe während der Simulation zu vermeiden, findet ein großskaliges Absinken statt. Weiterhin werden wolkenphysikalische Prozesse berücksichtigt. Strahlungsprozesse werden über vorgegebene Tendenzen einbezogen. Temperatur- und Feuchteflüsse werden an der Oberfläche konstante Werte zugewiesen. Ein Wert für den totalen Impulsfluss am Boden wird vorgegeben, indem die Schubspannungsgeschwindigkeit während der Simulation konstant gehalten wird. Des Weiteren werden Initialprofile für die aufgelöste TKE, der Temperatur und Feuchte spezifiziert. Störungen werden nicht wie in **PALM** üblich auf die Geschwindigkeitskomponenten aufgeprägt, sondern auf die potentielle Temperatur und die Feuchte. Genauere Vorgaben und Informationen zu der Initialisierung werden in (Siebesma et al., 2003) gegeben. Die dazu notwendigen Ergänzungen und Modifikationen des Modellcodes standen für diese Arbeit schon zur Verfügung.

In Abbildung 5.16 ist die totale Wolkenbedeckung während der Simulation aufgetragen, welche die größte Abhängigkeit von dem verwendeten Advektionsschema aufweist. Die Wolkenbedeckung berechnet sich, indem das Verhältnis zwischen Gitterpunkten, an denen Flüssigwasser vorkommt und der Gesamtanzahl an Gitterpunkten gebildet wird. Nach Einsetzen der Konvektion und einer Einschwingphase von zwei Stunden, die durch die aufgeprägten Störungen verursacht wird, pendelt sich das Ensemblemittel auf einen Wert von 13% ein. Es ist zu erkennen, dass mit PW die Wol-

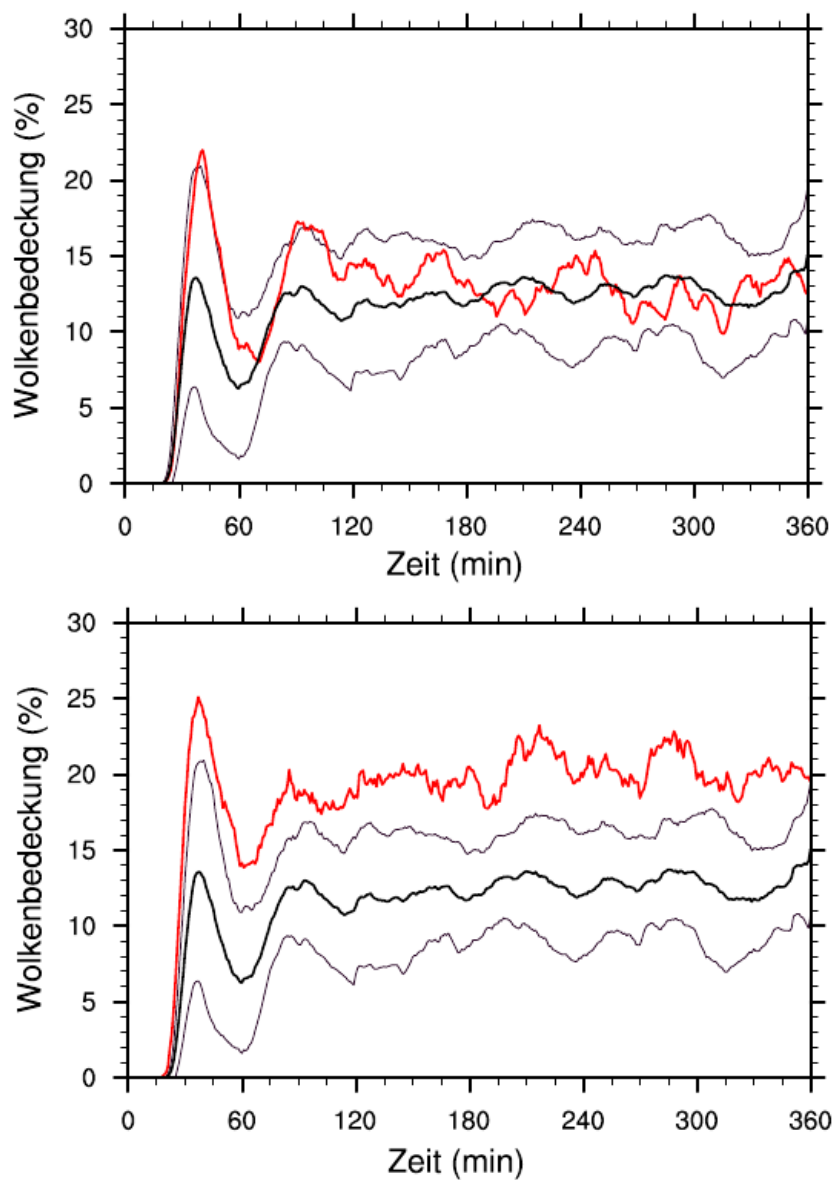


Abbildung 5.16: Zeitreihen für die totale Wolkenbedeckung mit WS5 (oben) und PW (unten). Die rote Linie zeigt die Zeitreihen mit **PALM** unter Verwendung von WS5 (oben) und PW (unten). Die schwarze Linie kennzeichnet das Ensemblemittel über die Ergebnisse der 11 anderen LES-Modelle, die dünnen Linien die sich daraus ergebende doppelte Standardabweichung.

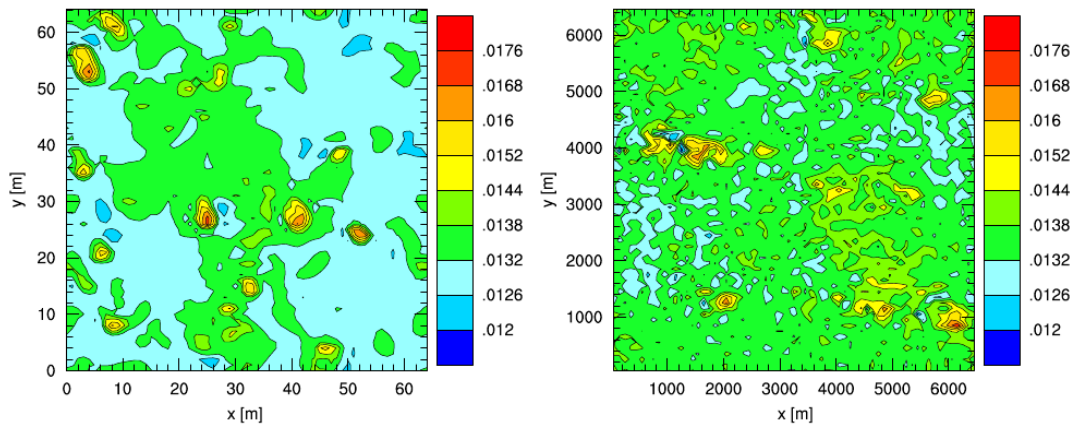


Abbildung 5.17: xy-Schnitte des Gesamtwassergehaltes $q \left[\frac{\text{g}}{\text{kg}} \right]$ in 980 m (Inversionshöhe) nach 5 Stunden mit WS5 (linke Seite) und PW (rechte Seite).

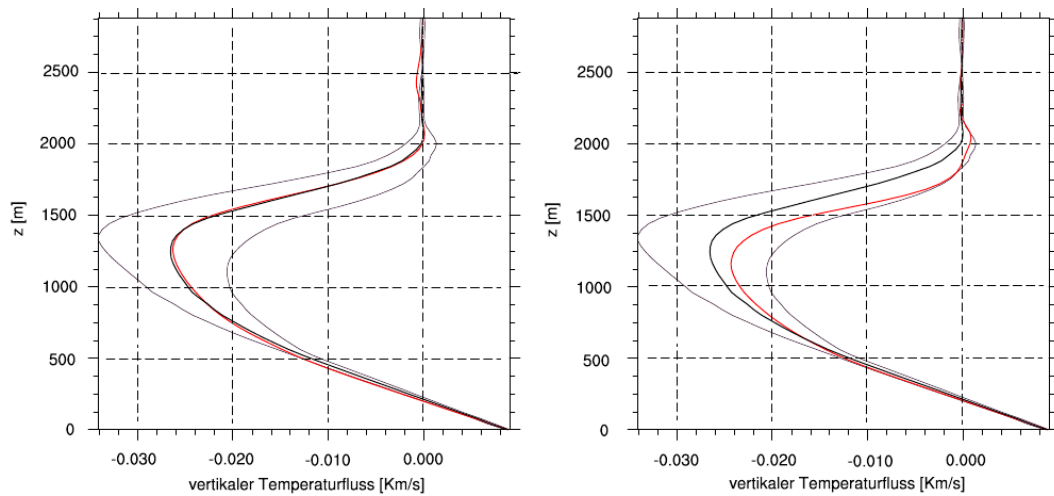


Abbildung 5.18: Profile für die den totalen Temperaturfluss mit WS5 (linke Seite) und PW (rechte Seite). Die rote Linie zeigt Profile für WS5 (linke Seite) und PW (rechte Seite). Die schwarze Linie kennzeichnet das Ensemblemittel über die Ergebnisse der 11 anderen LES-Modelle, die dünnen Linien die sich daraus ergebende doppelte Standardabweichung.

kenbedeckung systematisch um etwa 9% gegenüber dem Ensemblemittel überschätzt wird. Die Wolkenbedeckung mit WS5 liegt in der Standardabweichung der anderen Modelle. Infolge großer lokaler Gradienten an den Wolkenrändern zeigen die Ergebnisse große Abhängigkeiten von der verwendeten Numerik (Siebesma et al., 2003). Durch Dispersionsfehler werden die Gradienten mit weniger gut erhalten und die Wolken dispergieren, wie anhand des Gesamtwassergehalts in Abbildung 5.17 zu erkennen ist. Mit PW treten im Vergleich zu WS5 deutlich mehr kleinskalige Strukturen auf. Da bei der Berechnung der Wolkenbedeckung der Flüssigwassergehalt nur zwischen Null und größer Null unterschieden wird, führen diese kleinskaligen Strukturen zu einer flächenmäßig größeren Bedeckung durch die diskrete Auswertung. Die Simulation mit WS5 weist im Vergleich zu PW höhere Temperatur- und Feuchteflüsse in der Entrainment-Zone auf, wie hier anhand des vertikalen Temperaturflusses in Abbildung 5.18 dargestellt ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass wolkenphysikalische Prozesse weniger stark durch Dispersionsfehler beeinflusst werden (Siebesma et al., 2003), wie es mit PW der Fall ist.

Im Allgemeinen werden für den BOMEX-Fall unter Verwendung von WS5 geringere Abweichungen zu anderen Modellen festgestellt als es mit PW der Fall ist.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Mit der Methode der LES werden turbulente Strömungen und die darin auftretenden Phänomene grundlegend untersucht. Dazu ist jedoch eine genaue numerische Approximation der Modellgleichungen erforderlich. In der atmosphärischen Grenzschicht haben Advektionsprozesse einen großen Einfluss auf das Verhalten der Strömung, so dass die Diskretisierung der Advektionsterme eine wichtige Rolle bei der Lösung der Modellgleichungen spielt. Die für die Skalentrennung erforderliche räumliche Filterung der Modellgleichungen wird nicht nur durch die implizite Filterung des Gitters, sondern auch durch numerische Diskretisierungsfehler der Advektionsterme beeinflusst. Das hat zur Folge, dass die effektive Filterweite verringert wird und kleinskalige Strukturen großen numerischen Fehlern ausgesetzt sind. Unter Berücksichtigung des benötigten Rechenaufwandes wurde für eine verbesserte Diskretisierung das Verfahren von Wicker und Skamarock (2002) fünfter Ordnung (WS5) ausgewählt. Idealisierte ein- und zweidimensionale Advektionstests zeigten mit WS5 deutlich geringere Abweichungen zu der jeweiligen analytischen Lösung als das bisherige Standardverfahren von Piacsek und Williams (1970) (PW).

Aufgrund der höheren Anzahl an umliegenden Gitterpunkten, die in die Berechnung der Advektionsterme mit WS5 eingehen, sind drei Geisterränder anstatt bisher einer erforderlich. Bei der Implementierung von WS5 in **PALM** wurden bisher auf einen Geisterrand statisch festgelegte Schleifengrenzen, die Speicherallokierung von Feldern sowie der Austausch der Geisterränder so modifiziert, dass eine dynamische Anpassung in Abhängigkeit von Anzahl der benötigten Geisterränder möglich ist.

Erste Simulationen einer atmosphärischen Grenzschicht unter Verwendung von WS5 zeigten bodennahe Auffälligkeiten in den Profilen vertikaler und horizontaler Flüsse. Durch eine Modifikation der Berechnungsmethode der Flüsse, die konsistent zu der Diskretisierung der Advektionsterme ist, können die Auffälligkeiten vermieden werden. Im Zuge der Untersuchung dieser Auffälligkeiten wurde eine Beeinflussung der Geschwindigkeitsprofile, durch die zunächst auch für den Unterrand des Modellgebiets angenommenen drei Geisterränder, festgestellt. Durch einen schrittweisen Übergang zu Schemen niedrigerer Ordnung für die Vertikaladvektion an der Ober- und Untergrenze des Modellgebiets, kann ein Einfluss unphysikalischer Randwerte vermieden werden.

Anhand von Vergleichsstudien zwischen WS5 und PW konnten Einflüsse von numerischen Diskretisierungsfehlern auf die Simulationsergebnisse herausgearbeitet werden. Dabei hat sich herausgestellt, dass besonders der Energietransfer von den großen zu den kleinen Skalen beeinflusst wird. Durch Verwendung von WS5 werden größerskalige Strukturen besser erhalten und der durch Dispersionsfehler bedingte Energietransfer ist deutlich geringer als mit PW. Besonders in der Nähe großer Gradienten, wie sie zum Beispiel in der Entrainment-Zone oder an Wolkenrändern auftreten, zeigt WS5 realistischere Ergebnisse als PW. Um die genauen Zusammenhänge zwischen tur-

bulenten Größen und Diskretisierungsfehlern quantifizieren zu können, sind deutlich höher aufgelöste Simulationen und eine Analyse der Produktionsterme von turbulenter kinetischer Energie (TKE) notwendig.

Trotz der realistischeren Ergebnisse unter Verwendung von WS5, konnte festgestellt werden, dass die in WS5 enthaltene numerische Dissipation kleinskalige Strukturen zu stark dämpft und damit zum Teil Aufgaben des Subskalenmodells übernimmt. Um diesen unerwünschten Effekt der numerischen Dissipation zu minimieren, wurde versucht WS5 mit einer Dissipationskontrolle zu kombinieren. Dazu wurden verschiedene Methoden ausprobiert und anhand idealisierter Advektionstests getestet. Der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Ansatz D3, der auf der lokalen Varianz der advehierten Größe basiert, zeigte dabei die vielversprechendsten Ergebnisse. Anhand einer Fourieranalyse konnten verbesserte Dissipations- und Dispersionseigenschaften durch die Dissipationskontrolle belegt werden. Ein komplexerer Test der Methode stellte die Simulation einer konvektiven Grenzschicht dar, bei der D3 für die Advektion von Skalaren verwendet wurde. Verglichen mit dem Originalschema weisen die Ergebnisse auf eine geringere Dissipation kleinskaliger Strukturen und einem verringerten numerischen Energietransfer durch Dispersionsfehler hin. Für die Impulsadvektion, die anhand eines Rankine-Wirbels getestet wurde, verschlechterten sich die Ergebnisse unter Verwendung von D3 zum Teil. Die Ursache für dieses Verhalten, wie auch die Ursache der verbesserten Dispersionseigenschaften bei der Skalaradvektion, ist noch nicht geklärt. Für eine weitere Verbesserung von WS5 ist jedoch ein genaues mathematisches Verständnis der durch die Dissipationskontrolle entstehenden Kopplung zwischen Dissipations- und Dispersionsfehler unbedingt erforderlich. Weiterhin ist eine Optimierung der in D3 enthaltenen Konstante notwendig, um besser zwischen numerisch bedingten und physikalisch bedingten Fluktuationen unterscheiden zu können.

WS5 wurde im Rahmen dieser Arbeit in **PALM** für zyklische Randbedingungen unter Vernachlässigung von Topographie implementiert. Eine Anpassung für nicht-zyklische Randbedingungen und Topographie ist daher im weiteren erforderlich. Dies könnte in Zukunft durch ein vergleichbares Vorgehen wie an der Ober- und Untergrenze realisiert werden, indem in der Nähe fester Berandungen bzw. der Modellgebietsgrenze schrittweise zu Verfahren niedrigerer Ordnung übergegangen wird. Damit würde eine weitere Anpassung der Dirichlet- und Strahlungsrandbedingungen an den Ein- und Ausströmrändern, sowie damit verbundene Schwierigkeiten umgangen werden.

In Zukunft könnte überlegt werden, WS5 mithilfe des in Skamarock (2006) beschriebenen Flusskorrektur-Verfahrens in ein monotones Advektionsverfahren zu überführen. Dabei ist vor allem durch die Advektion positiv definiter Skalare eine weitere Verbesserung der Simulationsergebnisse zu erwarten.

Numerische Fehler entstehen bei jeder Diskretisierung und sind unvermeidlich. Um jedoch einen Einfluss auf das zu untersuchende Phänomen zu vermeiden, sollte entsprechend der Philosophie der LES, die Gitterweite möglichst klein gewählt werden.

Literaturverzeichnis

- Baldauf, M., 2008:** Stability analysis for linear discretisations of the advection equation with Runge-Kutta time integration. *J. Comput. Phys.*, **227**, 6638-6659.
- Breuer, M., 2002:** *Direkte Numerische Simulation und Large-Eddy Simulation turbulenter Strömungen auf Hochleistungsrechnern*. Shaker Verlag, Aachen, 1. Aufl., 433 S.
- Brown, A. R., M. K. MacVean und P. J. Mason, 2000:** The effects of numerical dissipation in Large Eddy Simulations. *J. Atmos. Sci.*, **120**, 3337-3348.
- Butcher, J.C., 1987:** *The numerical analysis of ordinary differential equations*. Wiley, 1. Aufl., 528 S.
- Bott, A., 1989:** A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1006-1015.
- Chlond, A., 1994:** Locally modified version of Bott's advection scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 111-125.
- Conzemius, R. und J. E. Fedorovich, 2006:** Dynamics of sheared convective boundary layer entrainment. Part 1: Methodological background and Large-Eddy Simulations. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 1151-1178.
- Conzemius, R. und J. E. Fedorovich, 2006:** Dynamics of sheared convective boundary layer entrainment. Part 2: Evaluation of bulk model predictions of entrainment flux. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 1179-1199.
- Courant, R., K. Friedrichs, und H. Lewy, 1928:** Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. *Math. Ann.*, **100**, 32-74.
- Deardorff, J. W., 1980:** Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol.*, **18**, 495-527.
- De, A. K. und V. Eswaran, 2006:** Analysis of a new high resolution upwind compact scheme. *J. Comput. Phys.*, **218**, 398-416.
- Deville, M. O., P. F. Fischer und E. H. Mund, 2002:** *High-order methods for incompressible fluid flow*. Cambridge University Press, Cambridge, 1. Aufl., 499 S.
- Drikakis, D., 2003:** Advances in turbulent flow computations using high-resolution methods. *Progress in Aerospace Sciences*, **39**, 405-424.

- Durran, D. R., 1999:** *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer Verlag, New York, 1. Aufl., 465 S.
- Dutton, J. A. und G. H. Fichtl, 1969:** Approximate equations of motion for gases and liquids. *J. Atmos. Sci.*, **23**, 241-254.
- Fröhlich, J., 2006:** *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Verlag, Wiesbaden, 1. Aufl., 414 S.
- Etling, D., 2002:** *Theoretische Meteorologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2. Aufl., 354 S.
- Ferziger, J. H. und M. Peric, 1999:** *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2. Aufl., 389 S.
- Fedorovich, E., R. Rotunno und B. Stevens, 2004:** *Atmospheric turbulence and mesoscale meteorology*. Cambridge University Press, Cambridge, 1. Aufl., 137 S.
- Glendening, J. W. und T. Haack, 2001:** Influence of advection differencing error upon Large-Eddy Simulation accuracy. *Boundary-Layer Meteorol.*, **98**, 127-153.
- Gropp, W., E. Lusk und A. Skjellum, 1999:** *Using MPI. Portable parallel programming with the Message-Passing Interface*. MIT Press, Cambridge, 2. Aufl., 371 S.
- Hundsdoerfer, W., B. Koren, M. van Loon und J. G. Verwer, 1995:** A positive finite-difference advection scheme. *J. Comput. Phys.*, **117**, 35-46.
- Kelly, M. und J. C. Wyngaard, 2006:** Two-dimensional spectra in the atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 3066-3070.
- Kessler, E., 1969:** On the distribution and continuity of water substance in atmospheric circulations. *Met. Monogr.*, **32**, 84
- Kniewel, J. C., G. H. Bryan und J. P. Hacker, 2007:** Explicit numerical diffusion in the WRF model. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, 3808-3824.
- Kolmogorov, A. N., 1941:** Die lokale Struktur der Turbulenz in einer inkompressiblen zähen Flüssigkeit bei sehr großen Reynoldsschen Zahlen. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, **32**, 299-303. Nachdruck in: H. Goering (Hsg.), 1958: *Statistische Theorie der Turbulenz.*, Akademie-Verlag, Berlin, 77-81.
- Kraus, H., 2008:** *Grundlagen der Grenzschicht-Meteorologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1. Aufl., 214 S.
- Kravchenko, A. G. und P. Moin 1996:** On the effect of numerical errors in Large Eddy Simulations of turbulent flows. *J. Comput. Phys.*, **131**, 310-322.
- Letzel, M. O., 2007:** *High resolution Large-Eddy Simulation of turbulent flow around buildings*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 108 S.

- Moeng, C.-H., J. Dudhia, J. Klemp und P. Sullivan, 2007:** Examining two-way grid nesting for Large Eddy Simulation of the PBL using the WRF model. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, 2295-2311.
- Monin, A. S. und A. M. Obukhov, 1954:** Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Trudy Academia Nauka SSR.*, **24**, 1963-1987.
- Morinishi, Y. T., S. Lund, O. V. Vasilyev, und P. Moin, 1998:** Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow. *J. Comput. Phys.*, **143**, 90-124.
- Otte, M. J. und J. C. Wyngaard, 2001:** Stably stratified interfacial-layer turbulence from Large-Eddy Simulation. *J. Atmos. Sci.*, **58**, 3424-3442.
- Patrinos, A. A. N. und A. L. Kistler, 1977:** A numerical study of the Chicago lake breeze. *Boundary-Layer Meteorol.*, **12**, 93-123.
- Park, N., Y. Jung Youl, und C. Haencheon, 2004:** Discretization errors in large eddy simulation: On the suitability of centered and upwind-biased compact difference schemes. *J. Comput. Phys.*, **6**, 392-405.
- Piacsek, S. A. und G. P. Williams, 1970:** Conservation properties of convection difference schemes. *J. Comput. Phys.*, **198**, 580-616.
- Pielke, R. A., 2002:** *Mesoscale meteorological modeling*. Academic Press, San Diego, 2. Aufl., 676 S.
- Price, G. V. und A. K. MacPherson, 1973:** A numerical weather forecasting method using cubic splines on a variable grid. *Mon. Wea. Rev.*, **12**, 1102-1113.
- Raasch, S. und M. Schröter, 2001:** PALM – A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, **10**, 363-372.
- Roache, P. J., 1985:** *Computational fluid dynamics*. Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexiko, 6. Aufl., 446 S.
- Schröter, M., 2003:** *Untersuchung der Evolution von Konvektionsstrukturen bei Kaltluftausbrüchen mit Hilfe eines parallelisierten Grobstrukturmodells*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 119 S.
- Schumann U., 1975:** Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. Comput. Sci.*, **18**, 376-404.
- Schumann U. und R. A. Sweet, 1988:** Fast Fourier Transforms for direct solution of Poisson's equation with staggered boundary conditions. *J. Comput. Sci.*, **75**, 123-137.
- Sengupta, T. K. und M. T. Nair, 1999:** Upwind schemes and Large Eddy Simulation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **31**, 879-889.

- Siebesma, A. P. und Koautoren, 2003:** A Large Eddy Simulation intercomparison study of shallow cumulus convection. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1201-1219.
- Shchepetkin, A. F. und J. C. McWilliams, 1998:** Quasi-monotone advection schemes based on explicit locally advaptive dissipation. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 1541-1580.
- Sjögreen, B. und H. C. Yee, 2004:** Multiresolution wavelet based adaptive numerical dissipation control for high order methods. *J. Sci. Comput.*, **20**, 211-255.
- Skamarock, W. C., 2006:** Positive-definite and montonic limiters for unrestricted-timestep transport schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **134**, 2241-2250.
- Smagorinsky, J., 1963:** General circulation experiments with the primitive equation. Part 1: The basic experiment. *Mon. Wea. Rev.*, **91**, 99-164.
- Stevens, B., C.-H. Moeng und P. Sullivan , 1999:** Large-Eddy Simulations of radiatively driven convection: Sensitivities to the representation of small scales. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 3963-3984.
- Stull, R. B., 1988:** *An introduction to boundary layer meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1. Aufl., 666 S.
- Uhlenbrock, J., 2006:** *Numerische Untersuchung der konvektiven Grenzschicht über realen heterogenen Landoberflächen mit einem Grobstruktursimulationsmodell*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 168 S.
- Tajallipour, N., B. B. Owlam und M. Paraschivoiu, 2009:** Self-adaptive upwinding for Large Eddy Simulation of turbulent flows on unstructured elements. *J. Aircraft*, **46**, 915-926.
- Tan, K. A., R. P. Morison und L. M. Leslie, 2005:** A comparison of high-order explicit and non-oscillatory finite difference advection schemes for climate and wheather models. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **89**, 251-267.
- Wang, H., W. C. Skamarock und G. Feingold, 2009:** Evaluation of scalar advection schemes in the advanced research WRF model using Large-Eddy Simulations of aerosol-cloud interactions. *Mon. Wea. Rev.*, **137**, 2547-2558.
- Wicker, L. J. und W. C. Skamarock, 2002:** Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **130**, 2088-2097.
- Williamson, J. H., 1980:** Low-storage Runge-Kutta schemes. *J. Comput. Phys.*, **35**, 48-56.

Danksagung

Ich bedanke mich bei Prof. Dr. Siegfried Raasch für die interessante Aufgabenstellung und die Betreuung meiner Diplomarbeit. Durch viele hilfreiche Anregungen und Vorschläge konnte er den Fortgang der Diplomarbeit stets zielführend vorantreiben.

Des Weiteren geht mein Dank an die Mitarbeiter der PALM-Arbeitsgruppe, die bei auftretenden Problemen und Fragestellungen immer eine große Hilfe waren.

Ein herzlicher Dank geht an die Korrekturleser dieser Arbeit, die mir mit ihren vielen Verbesserungsvorschlägen und Anregungen sehr weitergeholfen haben.

Bei Jens Fricke, Viola Hilger, Michael Schrempf und Linda Voß möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit während des Studiums bedanken.

Auch möchte ich besonders meiner Familie für die wertvolle Unterstützung einen großen Dank aussprechen.

Mein größter Dank gilt Farah Kanani, die mir immer Motivation und den nötigen Rückhalt gegeben hat.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel sowie dem Rat meiner akademischen Lehrer angefertigt habe.

Hannover, 18. Oktober 2010