

**Large-Eddy Simulation von bewölkten
Grenzschichten zur Untersuchung von Bilanzen
der statistischen Momente zweiter Ordnung
und zur Überprüfung von Turbulenzmodellen**

Von der Fakultät für Mathematik und Physik
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
zur Erlangung des Grades
Doktorin der Naturwissenschaften
Dr. rer. nat.
genehmigte Dissertation
von
Dipl.-Met. Rieke Heinze
geboren am 11. Juli 1984 in Barßel

Referent: Prof. Dr. S. Raasch
Korreferent: Prof. Dr. D. Etling
Tag der Promotion: 26. April 2013

Kurzzusammenfassung

Für die Turbulenzmodellierung sind die Bilanzen der Momente zweiter Ordnung von großer Bedeutung, da sie die Grundlage für viele Turbulenzmodelle darstellen. Im Rahmen des Schließungsansatzes zweiter Ordnung ist die Modellierung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen eine zentrale Aufgabe. Obwohl die Bilanzen und insbesondere auch die Modellierung der Druck-Kovarianzen für die Validierung und Weiterentwicklung von atmosphärischen Turbulenzmodellen wichtig sind, wurden sie bislang für Grenzschichten mit Bewölkung nicht umfassend untersucht. An dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit an, um mit der turbulenzauflösenden Large-Eddy Simulation (LES) Bilanzen von wesentlichen Momenten zweiter Ordnung für typische, feucht-konvektive Grenzschichten umfassend zu untersuchen und gängige Parametrisierungen für Druck-Kovarianzen zu überprüfen.

Mit dem LES-Modell PALM wurden hochauflösende Simulationen einer mit Kumulus und einer mit Stratokumulus bedeckten Grenzschicht über dem Meer durchgeführt, die auf beobachteten Fällen basieren. Während der Simulationen wurden zahlreiche Momente zweiter Ordnung und ihre Bilanzterme als horizontales und zeitliches Mittel bestimmt, um die Ensemble-gemittelten Bilanzgleichungen anzunähern. Die Druck-Kovarianzen wurden in einzelne Anteile zerlegt, welche sich aufgrund des Einflusses von turbulenten Interaktionen, Scherung, Auftrieb und Corioliskraft einstellen. Bei der Modellierung der Druck-Kovarianzen wird generell eine separate Parametrisierung der einzelnen Anteile vorgesehen. Daher wurde durch die Zerlegung die Überprüfung von gängigen Parametrisierungen für Druck-Kovarianzen ermöglicht. Es wurden zwei verschiedene Ansätze zur Modellierung der Druck-Kovarianzen mit den LES-Daten verglichen, welche ein häufig verwendetes Basismodell und ein komplexeres, nicht-lineares Modell waren.

Die Analyse der Bilanzen zeigte, dass die direkten Produktionsmechanismen durch Scherung und Auftrieb sowie die Dissipation bei bewölkten Grenzschichten für die Momente zweiter Ordnung von zentraler Bedeutung sind. Auch die Transportprozesse sowie die Umverteilung zwischen den Komponenten, für welche die Druck-Kovarianzen sorgen, sind keineswegs vernachlässigbar und sollten daher auch in vereinfachten Turbulenzmodellen zweiter Ordnung berücksichtigt werden.

Aus der Zerlegung der Druck-Kovarianzen folgte, dass die Beiträge aufgrund von turbulenten Interaktionen, Scherung und Auftrieb bei den bewölkten Grenzschichten maßgeblich sind und der Beitrag durch die Corioliskraft vernachlässigbar ist. Die relative Gewichtung der Anteile zueinander hängt von der Höhe ab, wobei der Scherungsanteil innerhalb der Wolkenschichten eine untergeordnete Rolle spielt. Ein Vergleich der LES-Daten mit den untersuchten Parametrisierungen für die Druck-Kovarianzen verdeutlichte, dass das komplexere Modell dem Basismodell nur in wenigen Fällen überlegen ist. Das Basismodell ist prinzipiell in der Lage die wesentlichen Beiträge der Druck-Kovarianzen qualitativ abzubilden und zeigt sich auch für die Modellierung von bewölkten Grenzschichten geeignet.

Schlagnworte: Atmosphärische Turbulenzmodellierung, Druck-Scher-Korrelation, Large-Eddy Simulation (LES) für Grenzschichten mit Wolken

Abstract

The budgets of second-order moments are of great importance for turbulence closures because they are the basis for most turbulence models. In the framework of second-order closures, the modeling of pressure-velocity and pressure-scalar covariances is a central challenge. Although the budgets and, most notably, the modeling of pressure covariances are crucial for the validation and further development of atmospheric turbulence models, they have not been analysed comprehensively for cloudy boundary layers so far. The main focus of the study is to examine the budgets of typical moist-convective boundary layers and to test well-established parameterisations for pressure covariances by means of large-eddy simulations (LES).

High resolution simulations of a cumulus- and a stratocumulus-topped boundary layer over the ocean, which are based on observed cases, were performed with the LES model PALM. During the simulations, various second-order moments and their budgets were determined as horizontal and temporal mean in order to approximate the ensemble-mean budgets. The pressure covariances were decomposed into several contributions due to turbulence-turbulence interactions, shear, buoyancy and Coriolis effects. The modeling of pressure covariances generally consists of a separate parameterisation of the single contributions. With the decomposition testing of well-established parameterisations for the pressure covariances was possible. Two different models were tested against the LES data which are a frequently used basic model and a more complex, non-linear model.

The analysis of the budgets showed that the direct mechanism of production due to shear and buoyancy and the dissipation are of central importance of the second-moment budgets in cloudy boundary layers. Third-order transport and redistribution among the components, for which the pressure covariances are responsible, are by no means negligible and should be accounted for in simplified second-order turbulence models.

The decomposition of the pressure covariances showed that the contributions due to turbulence-turbulence interactions, shear and buoyancy are significant for cloudy boundary layers and that the contribution due to Coriolis effects is negligible. The relative importance of the contributions depends on the height. The shear contribution is of minor importance inside the cloudy layers. The comparison of the LES data and the tested parameterisations for the pressure covariances illustrated that the more complex model is superior to the basic model only in a few cases. The basic model is principally able to reproduce the significant contributions qualitatively and is confirmed to be suitable for modeling cloudy boundary layers.

Keywords: atmospheric turbulence modeling, pressure redistribution, large-eddy simulation (LES) of cloudy boundary layers

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	V
Tabellenverzeichnis	VII
Symbolverzeichnis	IX
1 Einleitung	1
1.1 Turbulenzmodelle in der numerischen Wettervorhersage	1
1.2 Grenzschichten mit Wolken	3
1.3 Stand der Forschung	5
1.4 Fragestellungen und Struktur dieser Arbeit	11
2 Large-Eddy Simulation mit PALM	13
2.1 Turbulente Strömungen	13
2.2 Gleichungssystem	15
2.3 Subskalenmodell	19
2.4 Diskretisierung und numerische Lösungsverfahren	21
2.4.1 Zeitliche Diskretisierung	22
2.4.2 Räumliche Diskretisierung	23
2.4.3 Sicherstellen der Inkompressibilität	24
2.5 Rand- und Anfangsbedingungen	25
2.6 Parallelisierung und Hochleistungsrechner	27
3 Bestimmung von Bilanzgleichungen und Druck-Kovarianzen	29
3.1 Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung	29
3.1.1 Impulsflüsse und Geschwindigkeitsvarianzen	31
3.1.2 Turbulente kinetische Energie	33
3.1.3 Skalare Flüsse	34
3.1.4 Skalare Varianzen und Kovarianz	36
3.1.5 Technische Umsetzung im LES-Modell	37
3.2 Zerlegung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen	38
3.2.1 Poisson-Gleichungen für Druckanteile	38
3.2.2 Bestimmung der Druckanteile im LES-Modell	40
4 Simulierte Grenzschichten und ihre Eigenschaften	43
4.1 Trockene konvektive Grenzschicht	43
4.2 BOMEX – Kumulus-bedeckte Grenzschicht	45
4.2.1 Setup und Modellvergleich	45
4.2.2 Sensitivitätsuntersuchungen	48
4.3 DYCOMS – Stratokumulus-bedeckte Grenzschicht	52
4.3.1 Setup und Modellvergleich	53
4.3.2 Sensitivitätsuntersuchungen	57

5	Bilanzen der Momente zweiter Ordnung	63
5.1	Validierung der Bilanzenbestimmung anhand der trockenen konvektiven Grenzschicht	63
5.1.1	Vergleich mit MIRONOV <i>et al.</i> (2000)	63
5.1.2	Schließung der Bilanz der turbulenten kinetischen Energie	67
5.2	Bilanzen der turbulenten kinetischen Energie	71
5.3	Bilanzen der Geschwindigkeitsvarianzen	73
5.4	Bilanzen der Impulsflüsse	77
5.5	Bilanzen der skalaren Flüsse	82
5.6	Bilanzen der skalaren Varianzen und Kovarianz	89
5.7	Schlussfolgerungen für Turbulenzmodelle zweiter Ordnung	93
6	Modellierung von Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen	95
6.1	Validierung der Zerlegung anhand der trockenen konvektiven Grenzschicht	96
6.2	Komponenten der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen	98
6.3	Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen	102
6.4	Komponenten der Druck-Skalar-Kovarianzen	106
6.5	Überprüfung existierender Modelle für die Kovarianzen	109
6.5.1	Anteil durch turbulente Interaktionen	111
6.5.2	Anteil durch Scherung	117
6.5.3	Anteil durch Auftrieb	122
6.5.4	Vergleich zweier Aufspaltungen	127
6.6	Schlussfolgerungen für die Modellierung von Druck-Kovarianzen	130
7	Zusammenfassung und Ausblick	135
A	Anhang	139
A.1	Herleitung von Bilanzgleichungen am Beispiel der skalaren Varianz	139
A.2	Bestimmung von subskaligen Drucktermen	141
Literaturverzeichnis		143

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematischer Aufbau einer mit Kumulus bewölkten Grenzschicht	4
1.2	Schematischer Aufbau einer mit Stratokumulus bewölkten Grenzschicht	5
2.1	Variablenanordnung im versetzten Gitter von PALM im xz-Schnitt	26
4.1	Isoflächendarstellung des Flüssigwasserpfadefes für BOMEX zum Zeitpunkt $t = 6$ h.	46
4.2	Vertikalprofile von Momenten erster und zweiter Ordnung für BOMEX.	47
4.3	Vertikalprofile von Momenten erster und zweiter Ordnung für BOMEX in Abhängigkeit von Gitterweite und Advektionsverfahren.	50
4.4	Zeitliche Entwicklung des Bedeckungsgrades für BOMEX in Abhängigkeit von Gitterweite und Advektionsverfahren.	51
4.5	Vertikalprofile der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{13} und des turbulenten Transports \mathcal{T}_{q1} für BOMEX	52
4.6	Isoflächendarstellung des Flüssigwasserpfadefes für DYCOMS zum Zeitpunkt $t = 4$ h.	55
4.7	Vertikalprofile von Momenten erster und zweiter Ordnung für DYCOMS.	56
4.8	Zeitreihen der Grenzschichthöhe und der Wolkenbasis für DYCOMS	57
4.9	Vertikalprofile von Momenten erster und zweiter Ordnung für DYCOMS in Abhängigkeit von Gitterweite und Advektionsverfahren	59
4.10	Zeitreihen für DYCOMS in Abhängigkeit von Gitterweite und Advektionsverfahren	60
5.1	Terme der TKE-Bilanz einer trockenen konvektiven Grenzschicht	64
5.2	Terme der Bilanz der Temperaturvarianz einer trockenen konvektiven Grenzschicht	65
5.3	Terme der Bilanz des vertikalen Temperaturflusses einer trockenen konvektiven Grenzschicht	66
5.4	Terme der TKE-Bilanz einer trockenen konvektiven Grenzschicht bei Verwendung des PW-Advektionsverfahrens.	68
5.5	Vertikalprofile der Dissipationsraten und entsprechende Residuen der TKE-Bilanz einer trockenen konvektiven Grenzschicht	70
5.6	Vertikalprofile der TKE	71
5.7	Vertikalprofile der Bilanzterme der TKE	72
5.8	Vertikalprofile der horizontalen und vertikalen Geschwindigkeitsvarianzen	74
5.9	Vertikalprofile der Bilanzterme der Geschwindigkeitsvarianzen	75
5.10	Vertikalprofile der vertikalen und horizontalen Impulsflüsse	78
5.11	Vertikalprofile der Bilanzterme der vertikalen Impulsflüsse	79
5.12	Vertikalprofile der Bilanzterme des horizontalen Impulsflusses	81
5.13	Vertikalprofile der vertikalen und horizontalen Temperatur- und Feuchteflüsse	83
5.14	Vertikalprofile der Bilanzterme der vertikalen Temperatur- und Feuchteflüsse	85
5.15	Vertikalprofile der Bilanzterme der zonalen Temperatur- und Feuchteflüsse	87

5.16	Vertikalprofile der Bilanzterme der meridionalen Temperatur- und Feuchteflüsse	88
5.17	Vertikalprofile der skalaren Varianzen und der Kovarianz aus Temperatur und Feuchte	90
5.18	Vertikalprofile der Bilanzterme der skalaren Varianzen	91
5.19	Vertikalprofile der Bilanzterme der Kovarianz aus Temperatur und Feuchte	92
6.1	Vertikalprofile der Standardabweichung der turbulenten Druckfluktuation einer trockenen konvektiven Grenzschicht	97
6.2	Vergleich der totalen Standardabweichung der Druckfluktuation und vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz mit der Summe aller Anteile	97
6.3	Vertikalprofile der vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz einer trockenen konvektiven Grenzschicht	98
6.4	Vertikalprofile der Standardabweichung der turbulenten Druckfluktuation und ihre Anteile	99
6.5	Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{11} und Π_{33} sowie ihre Anteile	100
6.6	Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{13} und ihre Anteile	102
6.7	Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen $\tilde{\phi}_{11}$ und $\tilde{\phi}_{33}$	104
6.8	Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{13}$	105
6.9	Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$ und Druck-Feuchte-Kovarianz $\Pi_{q 3}$ und ihre jeweiligen Anteile	107
6.10	Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 1}$ und Druck-Feuchte-Kovarianz $\Pi_{q 1}$ und ihre jeweiligen Anteile	108
6.11	Vertikalprofile der Dissipationszeitkalen	113
6.12	Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{11}^T , Π_{33}^T und Π_{13}^T sowie ihre Modellierung	114
6.13	Druck-Temperatur-Kovarianzen $\Pi_{\theta 3}^T$ und $\Pi_{\theta 1}^T$ sowie ihre Modellierung	116
6.14	Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{33}^S , Π_{12}^S und Π_{13}^S sowie ihre Modellierung	120
6.15	Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 1}^S$ sowie ihre Modellierung	121
6.16	Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{11}^B , Π_{33}^B und Π_{13}^B sowie ihre Modellierung	124
6.17	Druck-Temperatur-Kovarianzen $\Pi_{\theta 3}^B$ und $\Pi_{\theta 1}^B$ sowie ihre Modellierung	126
6.18	Deviatorische Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen $-\phi_{33}^T$, $-\phi_{13}^S$ und $-\phi_{11}^B$ sowie ihre Modellierung	129

Tabellenverzeichnis

4.1	Zusammenfassung der im Rahmen der Sensitivitätsuntersuchungen durchgeführten Simulationen für BOMEX.	49
4.2	Zusammenfassung der im Rahmen der Sensitivitätsuntersuchungen durchgeführten Simulationen für DYCOMS.	58
6.1	Werte der angepassten Modellierungskonstanten C_T^u und C_T	115
6.2	Werte der angepassten Modellierungskonstanten C_S^u und C_S	122
6.3	Werte der angepassten Modellierungskonstanten C_B^u und C_B	125
6.4	Werte der an $-\phi_{ij}$ angepassten Modellierungskonstanten C_T^u , C_S^u und C_B^u . .	130

Symbolverzeichnis

Abkürzungen

AHATS	Advection Horizontal Array Turbulence Study
BC	Bott-Chlond
BOMEX	Barbados Oceanographic and Meteorological Experiment
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy (Zeitschrittkriterium)
CPU	Central Processing Unit
CTEI	Cloud-top Entrainment Instability
COSMO	Consortium for Small Scale Modelling
DALES	Dutch Atmospheric Large-Eddy Simulation
DNS	Direkte Numerische Simulation
DYCOMS-II	Second Dynamics and Chemistry of Marine Stratocumulus
FC	Free Convection
GCSS	GEWEX Cloud System Study
GEWEX	Global Energy and Water Cycle Experiment
HLRN	Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen
IP	Isotropization of Production
LES	Large-Eddy Simulation
LWP	Liquid Water Path
MPI	Message Passing Interface
PALM	Parallelized Large-Eddy Simulation Model
PW	PIACSEK und WILLIAMS (1970)
PE	Prozessorelement
QQ	Totale Varianz des Gesamtwassergehalts
QT	Totale Varianz der Kovarianz aus Gesamtwassergehalt und Flüssigwassertemperatur
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RICO	Rain in Cumulus over the Ocean
RRZN	Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen
SGS	SubGrid-Scale (subskalig)
TCL	Two-Component-Limit (Zwei-Komponenten-Grenzfall)
TKE	Turbulente kinetische Energie
TT	Totale Varianz der potentiellen Flüssigwassertemperatur
UQ	Totaler zonaler Fluss des Gesamtwassergehalts
UT	Totaler zonaler Fluss der potentiellen Flüssigwassertemperatur

UU	Totale Varianz der zonalen Geschwindigkeitskomponente
UV	Totaler horizontaler Impulsfluss
VQ	Totaler meridionaler Fluss des Gesamtwassergehalts
VV	Totale Varianz der meridionalen Geschwindigkeitskomponente
VT	Totaler meridionaler Fluss der potentiellen Flüssigwassertemperatur
WCRP	World Climate Research Program
WQ	Totaler vertikaler Fluss des Gesamtwassergehalts
WS	WICKER und SKAMAROCK (2002)
WT	Totaler vertikaler Fluss der potentiellen Flüssigwassertemperatur
WU	Totaler zonaler vertikaler Impulsfluss
WV	Totaler meridionaler vertikaler Impulsfluss
WW	Totale Varianz der vertikalen Geschwindigkeitskomponente

Lateinische Symbole

a_{ij}	<i>Departure-from-isotropy</i> -Tensor
A	<i>Flatness</i> -Parameter nach LUMLEY (1978)
A_1, A_2	Invarianten von a_{ij}
\tilde{c}, c_θ	Konstanten für die Parametrisierung der Dissipationsrate ϵ_θ
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_{α_i}	Konstante zur Bestimmung des Spektrums im Inertialbereich
$C_B^u, C_B, C_S^u, C_S,$ C_T^u, C_T	Modellierungskonstanten des Basismodells
$C_{S1}^u, C_{S1}, C_{S2}^u,$ C_{S2}	Modellierungskonstanten nach ZEMAN (1981)
$C_{T1}^u, C_{T1}, C_{T2}^u,$ $C_{T2}, C_{T3}, C_{T4},$ C_{T5}	Koeffizienten für den turbulenten Anteil des TCL-Modells
d	Abstand zur nächsten festen Oberfläche
\tilde{D}	Strömungsgebiet
D	Divergenz des großräumigen Windfeldes
e	Subskalige turbulente kinetische Energie
E	Totale turbulente kinetische Energie
f_{dt}	Sicherheitsfaktor für Zeitschrittkriterium
f_i	Coriolisparameter, $i \in \{1, 2, 3\}$
F_0, F_1	Konstanten in Parametrisierung für F_{rad}
F_{rad}	Langwelliger Netto-Strahlungsfluss
g	Schwerebeschleunigung
G	Filterfunktion

h	Höhe der Grenzschicht
H	Heavyside-Funktion (Stufenfunktion)
H_{q0}	Oberflächennaher Fluss des Gesamtwassergehalts
$H_{\theta 0}$	Oberflächennaher Fluss der potentiellen Flüssigwassertemperatur
\tilde{k}	Wellenzahl
l	Mischungsweglänge
L_v	Verdunstungswärme
L_x, L_y	Gebietserstreckung in x- und y-Richtung
K_1, K_2	Koeffizienten nach CUIJPERS und DUYNKERKE (1993)
K_m	Diffusionskoeffizient für Impuls
K_h	Diffusionskoeffizient für Skalare
n_e	Anzahl unabhängiger Realisationen des Strömungsfeldes $n \in \mathbb{N}$
N	Gesamtgitterpunktanzahl
N_x, N_y, N_z, N_i	Gitterpunktanzahl in x-, y- und z-Richtung, $i \in \{1, 2, 3\}$
p	Mesoskalige Druckabweichung
\tilde{p}	Druck
p_A	Druckanteil aufgrund von Advektion
p_B	Druckanteil aufgrund von Auftrieb
p_C	Druckanteil aufgrund von Corioliskraft
p_L	Synoptisch-skalige Druckabweichung
p_S	Druckanteil aufgrund Scherung
p_{SG}	Druckanteil aufgrund des Subskalenmodells
p_{SU}	Druckanteil aufgrund von großräumigem Absinken
p_T	Druckanteil aufgrund von turbulenten Interaktionen
$P_{\bar{u}_i}$	Spektrale Energie, $i \in \{1, 2, 3\}$
q_l	Flüssigwassergehalt
q_v	Spezifische Feuchte
q_s	Sättigungswert der spezifischen Feuchte
Q_θ, Q_s	Quellen und Senken der potentiellen Temperatur bzw. der skalaren Größe
$\overline{Q}_{\psi, SU}$	Quellterm aufgrund von großräumigem Absinken, $\psi \in \{u, v, \theta_1, q\}$
r_1	Mischungsverhältnis des Flüssigwassergehalts
$r^{(l)}$	Faktor in Prädiktor-Korrektor Methode, $l \in \{1, 2, 3\}$
R	Quotient von Dissipationszeitskalen
Re	Reynoldszahl
R_L	Spezifische Gaskonstante trockener Luft
R_v	Spezifische Gaskonstante Wasserdampf
s	Skalare Größe
S_{ij}	Symmetrischer Deformationstensor

t	Zeit
t_*	Konvektive Zeitskala
t^n	Diskreter Zeitpunkt, $n \in \mathbb{N}$
T	Aktuelle Temperatur
u, v, w, u_i	Komponenten der Windgeschwindigkeit, $i \in \{1, 2, 3\}$
u_{g_i}	Komponente des geostrophischen Windvektors, $i \in \{1, 2\}$
u_i^A	Geschwindigkeitskomponente aufgrund von Advektion $i \in \{1, 2, 3\}$
u_i^B	Geschwindigkeitskomponente aufgrund von Auftrieb $i \in \{1, 2, 3\}$
u_i^C	Geschwindigkeitskomponente aufgrund von Corioliskraft $i \in \{1, 2, 3\}$
u_i^{SG}	Geschwindigkeitskomponente aufgrund des Subskalenmodells $i \in \{1, 2, 3\}$
u_i^{SU}	Geschwindigkeitskomponente aufgrund von großräumigem Absinken $i \in \{1, 2, 3\}$
$u_{i,vorl}$	Vorläufiges Geschwindigkeitsfeld, $i \in \{1, 2, 3\}$
u_*	Schubspannungsgeschwindigkeit
V	Gittervolumen
w_s	Großräumige Absinkgeschwindigkeit
w_*	Konvektive Geschwindigkeitsskala
W_{ij}	Antisymmetrischer Deformationstensor
x, y, z, x_i	Kartesische Koordinaten, $i \in \{1, 2, 3\}$
z_b	Höhe der Wolkenbasis
z_i	Höhe der Grenzschicht
$z_{i,loc}$	Lokale Höhe der Grenzschicht
z_t	Höhe des unteren Modellrandes

Griechische Symbole

α	Kolmogorov-Konstante
$\tilde{\alpha}$	Unabhängige Realisation des Strömungsfeldes
$\alpha_i, \beta_{i+1,j}$	Koeffizienten des Runge-Kutta-Verfahrens, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Γ	Exner-Funktion
δ_{ij}	Kronecker-Symbol
$\tilde{\Delta}$	Charakteristische Filterlänge
Δ	Charakteristische Gitterweite
Δt	Zeitschritt
Δt_{CFL}	Zeitschritt nach CFL-Kriterium
Δt_{Diff}	Zeitschritt nach Diffusionskriterium
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Gitterweite in x-, y- und z-Richtung

ϵ	Dissipationsrate der TKE
ϵ_{ijk}	Alternierender Einheitstensor, $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$
ϵ_q	Dissipationsrate der Varianz des Gesamtwassergehalts
ϵ_s	Dissipationsrate der Varianz eines Skalars
$\epsilon_{sp,i}$	Dissipationsrate der TKE aus dem Spektrum bestimmt
ϵ_θ	Dissipationsrate der Varianz der potentiellen Flüssigwassertemperatur
$\epsilon_{\theta q}$	Molekulare Destruktionsrate der Kovarianz aus potentieller Flüssigwassertemperatur und Gesamtwassergehalt
ζ	Subskalige Varianz eines Skalars
η	Kolmogorov-Länge
θ	Potentielle Temperatur
θ_1	Potentielle Flüssigwassertemperatur
θ_v	Virtuelle potentielle Temperatur
θ_*	Konvektive Temperaturskala
ϑ	Subskalige Varianz der potentiellen Flüssigwassertemperatur
κ	Subskalige Varianz des Gesamtwassergehalts
$\tilde{\kappa}$	Konstanten in Parametrisierung für F_{rad}
ν	Kinematische Viskosität
ν_m, ν_θ, ν_s	Molekulare Diffusionskoeffizienten für Impuls, potentielle Temperatur und ein Skalar
π	Modifizierte Druck
$\pi^{(i)}$	Modifizierte Druck zum i -ten Runge-Kutta Teilzeitschritt
Π_{ij}	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianz (Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz), $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^A	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund von Advektion, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^B	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund von Auftrieb, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^C	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund von Corioliskraft, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^S	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund von Scheerung, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^{SG}	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund des Subskalensmodells, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^{SU}	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund von großräumigem Absinken, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Π_{ij}^T	Aufgelöste Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz aufgrund von turbulenten Interaktionen, $i, j \in \{1, 2, 3\}$

$\Pi_{\theta i}, \Pi_{qi}, \Pi_{si}$	Aufgelöste Temperatur-Druckgradient-Kovarianz (Druck-Temperatur-Kovarianz), aufgelöste Feuchte-Druckgradient-Kovarianz (Druck-Feuchte-Kovarianz) und aufgelöste Skalar-Druckgradient-Kovarianz (Druck-Skalar-Kovarianz), $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^A, \Pi_{qi}^A, \Pi_{si}^A$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von Advektion, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^B, \Pi_{qi}^B, \Pi_{si}^B$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von Auftrieb, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^C, \Pi_{qi}^C, \Pi_{si}^C$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von Corioliskraft, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^S, \Pi_{qi}^S, \Pi_{si}^S$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von Scherung, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^{SG}, \Pi_{qi}^{SG}, \Pi_{si}^{SG}$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von Subskalenmodell, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^{SU}, \Pi_{qi}^{SU}, \Pi_{si}^{SU}$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von großräumigem Absinken, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\Pi_{\theta i}^T, \Pi_{qi}^T, \Pi_{si}^T$	Aufgelöste Druck-Temperatur-, Druck-Feuchte- und Druck-Skalar-Kovarianz aufgrund von turbulenten Interface, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
ρ	Dichte
ρ_i	Luftdichte direkt unterhalb der Wolkenobergrenze
τ_E	Dissipationszeitskala der TKE
$\tau_\theta, \tau_q, \tau_s$	Dissipationszeitskalen der Temperatur-, Feuchte- und Skalarvarianz
τ_{ij}	Subskaliger Impulsflusstensor, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
τ_{ij}^r	Reduzierter subskaliger Impulsflusstensor, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
τ_{vi}	Subskaliger Fluss der virtuellen potentiellen Temperatur, $i \in \{1, 2, 3\}$
$\tau_{\theta i}, \tau_{qi}, \tau_{si}$	Subskaliger Temperatur-, Feuchte- und Skalarfluss, $i \in \{1, 2, 3\}$
$\tau_{q\theta}$	Subskalige Kovarianz aus Temperatur und Feuchte
φ	Geographische Breite
ϕ_{ij}	Aufgelöste deviatorische Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\tilde{\phi}_{ij}$	Aufgelöste Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erde

Mittelungen und Indizes angewendet auf eine Variable ψ

$\bar{\psi}$	Gefilterte, aufgelöste Größe
ψ'	Subskalige Fluktuation
$\hat{\psi}$	Ensemble-Mittel
ψ'	Abweichung vom Ensemble-Mittel

$\langle \psi \rangle$	Horizontales Mittel
ψ''	Abweichung vom horizontalen Mittel
$\langle \psi \rangle_z$	Räumliches Mittel in z-Richtung
ψ_0	Grundzustand (Boussinesq-Approximation)

Operatoren

∂	Partieller Differentialoperator
\int	Integral-Operator

Übrige Symbole

\mathcal{B}_{TKE}	Produktion von TKE durch Auftrieb, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{B}_{ij}	Produktion von Impulsfluss durch Auftrieb, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{B}_{\theta i}, \mathcal{B}_{qi}, \mathcal{B}_{si}$	Produktion von Temperatur-, Feuchte- und Skalarfluss durch Auftrieb $i \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{C}_{ij}	Produktion von Impulsfluss durch Corioliskraft, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{C}_{\theta i}, \mathcal{C}_{qi}$	Produktion von Temperatur- und Feuchtefluss durch Corioliskraft $i \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{D}_{TKE}	Dissipation von TKE, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$	Dissipation der TKE bei Verwendung der Dissipationsrate aus der Residuenmethode
$\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{sp}}$	Dissipation der TKE bei Verwendung der Dissipationsrate aus Spektren
$\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{tr}}$	Dissipationsrate der TKE bei Verwendung des spektralen Transferterms als Dissipationsrate
\mathcal{D}_{ij}	Dissipation von Impulsfluss, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{D}_{\theta\theta}, \mathcal{D}_{qq}$	Dissipation von Temperatur- und Feuchtevarianz
$\mathcal{D}_{q\theta}$	Molekulare Destruktion von Kovarianz aus Temperatur und Feuchte
$\tilde{\mathcal{F}}_{ij}$	Subskalige Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{G}_{ij}	Produktion von Impulsfluss durch Scherung, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{G}_{\theta i}^{\theta}, \mathcal{G}_{qi}^q$	Produktion von Temperaturfluss durch den mittleren Gradienten der Temperatur, Produktion von Feuchtefluss durch den mittleren Gradienten der Feuchte, $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{G}_{\theta i}^u, \mathcal{G}_{qi}^u, \mathcal{G}_{si}^u$	Produktion von Temperatur-, Feuchte- und Skalarfluss durch den mittleren Gradienten der Geschwindigkeit, $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{G}_{\theta\theta}$	Produktion von Temperaturvarianz durch den mittleren Gradienten der Temperatur

\mathcal{G}_{qq}	Produktion von Feuchtevarianz durch den mittleren Gradienten der Feuchte
$\mathcal{G}_{q\theta}^q$	Produktion von Kovarianz aus Temperatur und Feuchte durch den mittleren Gradienten der Feuchte
$\mathcal{G}_{q\theta}^\theta$	Produktion von Kovarianz aus Temperatur und Feuchte durch den mittleren Gradienten der Temperatur
\mathcal{I}_{ij}	Aufgelöster isotroper Transportterm, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{L}	Charakteristische Längenskala einer Strömung
\mathcal{M}_{TKE}	Zeitliche Änderung der TKE
\mathcal{M}_{ij}	Zeitliche Änderung des Impulsflusses, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{M}_{\theta i}, \mathcal{M}_{qi}$	Zeitliche Änderung des Temperatur- und Feuchteflusses, $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{M}_{\theta\theta}, \mathcal{M}_{qq}, \mathcal{M}_{q\theta}$	Zeitliche Änderung des Temperaturvarianz, Feuchtevarianz und Kovarianz aus Temperatur und Feuchte
\mathcal{P}_{ij}	Subskalige Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianz (Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz), $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{P}_{\theta i}, \mathcal{P}_{qi}, \mathcal{P}_{si}$	Subskalige Temperatur-Druckgradient-Kovarianz (Druck-Temperatur-Kovarianz), subskalige Feuchte-Druckgradient-Kovarianz (Druck-Feuchte-Kovarianz) und subskalige Skalar-Druckgradient-Kovarianz (Druck-Skalar-Kovarianz), $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{Q}_{\theta i}, \mathcal{Q}_{qi}$	Quellen und Senken für Temperatur- und Feuchtefluss
$\mathcal{Q}_{\theta\theta}, \mathcal{Q}_{qq}, \mathcal{Q}_{q\theta}$	Quellen und Senken für Temperatur-, Feuchtevarianz und Kovarianz aus Temperatur und Feuchte
\mathcal{R}_{TKE}	Residuum der TKE-Bilanz
$\mathcal{R}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$	Residuum der TKE-Bilanz bei Verwendung der Dissipationsrate aus der Residuenmethode
$\mathcal{R}_{\text{TKE}}^{\text{sp}}$	Residuum der TKE-Bilanz bei Verwendung der Dissipationsrate aus Spektren
$\mathcal{R}_{\text{TKE}}^{\text{tr}}$	Residuum der TKE-Bilanz bei Verwendung des spektralen Transferterms als Dissipationsrate
\mathcal{R}_{ij}	Residuum der Bilanz des Impulsflusses $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{R}_{\theta i}, \mathcal{R}_{qi}, \mathcal{R}_{si}$	Residuum der Bilanzen des Temperatur-, Feuchte- und Skalarflusses $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{R}_{\theta\theta}, \mathcal{R}_{qq}, \mathcal{R}_{q\theta}$	Residuum der Bilanz der Varianz der Temperatur und der Feuchte sowie der Kovarianz aus Temperatur und Feuchte
\mathcal{S}_{TKE}	Produktion von TKE durch Scherung
$\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{p}}$	Transport von TKE durch Druckfluktuationen
$\mathcal{T}_{\theta i}, \mathcal{T}_{qi}$	Transport von Temperatur- und Feuchtefluss durch turbulente Bewegungen $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{T}_{\theta\theta}, \mathcal{T}_{qq}, \mathcal{T}_{q\theta}$	Transport von Temperaturvarianz, Feuchtevarianz und Kovarianz aus Temperatur und Feuchte durch turbulente Bewegungen

\mathcal{T}_{ij}^p	Aufgelöster Transport von Impulsfluss durch Druckfluktuationen, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{T}_{ij}^{p,sg}$	Subskaliger Transport von Impulsfluss durch Druckfluktuationen, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{T}_{TKE}^t	Transport von TKE durch turbulente Bewegungen
\mathcal{T}_{ij}^t	Transport von Impulsfluss durch turbulente Bewegungen, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
\mathcal{U}	Charakteristische Geschwindigkeitsskala einer Strömung
\mathcal{W}_{TKE}	Produktion von TKE durch großräumiges Absinken
\mathcal{W}_{ij}	Produktion von Impulsfluss durch großräumiges Absinken, $i, j \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{W}_{\theta i}, \mathcal{W}_{qi}$	Produktion von Temperatur- und Feuchtefluss durch großräumiges Absinken $i \in \{1, 2, 3\}$
$\mathcal{W}_{\theta\theta}, \mathcal{W}_{qq}, \mathcal{W}_{q\theta}$	Produktion von Temperatur- und Feuchtevarianz sowie Kovarianz durch großräumiges Absinken

1 Einleitung

1.1 Turbulenzmodelle in der numerischen Wettervorhersage

Turbulenz ist für die Wettervorhersage von zentraler Bedeutung, da sie vielfältige Austauschprozesse hervorruft, die sich auf wichtige Vorhersagegrößen wie z.B. Temperatur und Windstärke auswirken. Allerdings sind die turbulenten Wirbel mit Durchmessern von 10^{-3} bis 10^3 m deutlich kleiner als die gegenwärtig verwendeten horizontalen Gitterweiten in numerischen Wettervorhersagemodellen¹. Daher wird Turbulenz in diesen Modellen nicht aufgelöst und muss über *Turbulenzmodelle* berücksichtigt werden.

Turbulenz tritt vor allem in der atmosphärischen Grenzschicht, der Luftschicht direkt oberhalb des Erdbodens, in Erscheinung. Dort macht sich der Einfluss des Bodens durch Reibung und Erwärmung bzw. Abkühlung bemerkbar, was zu signifikanten Wärme-, Impuls- und Materieflüssen führt. Turbulenz als solche umspannt einen weiten Bereich räumlicher und zeitlicher Skalen und kann als Überlagerung von Wirbeln unterschiedlicher Größe aufgefasst werden (STULL, 1988, S. 4).

In der Wettervorhersage wird die zeitliche Entwicklung der mittleren Strömung prognostiziert (z.B. WYNGAARD, 2010, S. 18) und Turbulenz damit statistisch beschrieben. Die einem Wettermodell zugrunde liegenden Gleichungen werden also einer Mittelung unterzogen, wodurch sich zusätzliche, unbekannte Terme ergeben. Für diese Unbekannten können weitere Gleichungen aufgestellt werden, die aber wieder andere Unbekannte beinhalten. Dies führt letztlich zum *Schließungsproblem der Turbulenztheorie*, welches besagt, dass ein endliches Gleichungssystem zur statistischen Beschreibung von Turbulenz nicht geschlossen ist (STULL, 1988, S. 197ff). Um dem Schließungsproblem zu begegnen, werden die Unbekannten durch die bekannten, mittleren Größen ausgedrückt (parametrisiert). Dieser Vorgang führt zum Aufstellen eines Turbulenzmodells, welches auch als *Turbulenzparametrisierung* bezeichnet wird.

Turbulenzmodelle basieren auf Gleichungen für statistische Momente. Als Moment erster Ordnung wird das Mittel einer Größe bezeichnet. Die Varianz einer Größe oder auch die Kovarianz von zwei fluktuierenden Größen wird Moment zweiter Ordnung genannt (GARRAT, 1992, S. 18). Eine Kovarianz aus drei fluktuierenden Größen ist ein Moment dritter Ordnung usw. Außerdem können die Turbulenzparametrisierungen an sich hierarchisch geordnet werden. Eine Turbulenzparametrisierung wird als Schließung erster Ordnung bezeichnet, wenn Gleichungen für die Momente erster Ordnung, also die Mittelwerte, gelöst werden und die Momente zweiter Ordnung mit einem Modell approximiert werden (STULL, 1988, S. 199f). Bei der Schließung zweiter Ordnung werden die Gleichungen für die Momente zweiter Ordnung gelöst und die Momente dritter Ordnung modelliert. Werden Gleichungen nicht für alle Momente einer Ordnung gelöst, wird der Zusatz der *halben Ordnung* verwendet. Eine Schließung anderthalbfacher Ordnung beispielsweise kann das Lösen von Gleichungen für die mittleren Größen sowie die turbulente kinetische Energie (TKE) als Moment zweiter Ordnung beinhalten (z.B. STULL, 1988, S. 200).

Die Literatur lässt eine grobe Einteilung in zwei prinzipielle Ansätze zur Schließung zu:

¹Aufgrund heutiger Rechenkapazitäten liegen die horizontalen Gitterweiten in numerischen Wettervorhersagemodellen in einem Bereich von ca. 5-10 km (MIRONOV, 2009, S. 163)

lokale und *nicht-lokale* Schließungen (z.B. STENSRUD, 2007, S. 151). Bei lokalen Schließungen werden die unbekanntes Größen mittels bekannter Größen am selben Ort bzw. in unmittelbarer Nähe parametrisiert. Dabei wird angenommen, dass sich Turbulenz analog zur molekularen Diffusion verhält. Im Gegensatz dazu erfolgt die Modellierung bei nicht-lokalen Schließungen mittels bekannter Größen an verschiedenen Orten. Dies spiegelt die Annahme wieder, dass Turbulenz als Überlagerung von Wirbeln unterschiedlicher Größe interpretiert werden kann (STULL, 1988, S. 200).

In numerischen Wettermodellen wird generell zwischen *Turbulenz* und *Konvektion* unterschieden (MIRONOV, 2009, S. 162f). Dabei beschreibt Turbulenz klein-skalige, zufällige Bewegungen, während Konvektion größer-skalige, organisierte Bewegungen beinhaltet. Diese Unterscheidung äußert sich auch in unterschiedlichen Ansätzen zur Parametrisierung. So werden Turbulenzparametrisierungen häufig auf Basis der lokalen Schließung zweiter Ordnung entwickelt und Konvektionsparametrisierungen im Rahmen von nicht-lokalen Massenflussansätzen behandelt.

Im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung, welche zu den lokalen Ansätzen zählt, werden Bilanzgleichungen der statistischen Momente zweiter Ordnung gelöst, die unter Benutzung des Reynolds-Mittels aufgestellt werden (z.B. STULL, 1988, S. 220ff; STENSRUD, 2007, S. 172ff; MIRONOV, 2009, S. 165ff). In der feuchten Grenzschicht umfasst dies Transportgleichungen für die Impulsflüsse, die turbulente kinetische Energie, die Temperaturvarianz, die Temperaturflüsse, die Varianz und die Flüsse einer Feuchtegröße sowie die Kovarianz von Temperatur und Feuchte. In dem Gleichungssatz ergeben sich dann drei Gruppen an Unbekannten, die modelliert werden müssen:

1. Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen,
2. Korrelationen dritter Ordnung
3. Dissipationsraten der Momente zweiter Ordnung.

Häufig werden die Gleichungen noch durch Weglassen von unwichtigeren Termen vereinfacht.

Konvektion wird grundsätzlich in *hochreichende* und *flache* Konvektion unterteilt. Dabei besteht hochreichende Konvektion aus konvektiven Elementen, die einen Großteil der Troposphäre umfassen (z.B. Gewitter) und Niederschlag produzieren. Dagegen ist die typische Grenzschichtbewölkung (wie flacher Kumulus und Stratokumulus) flache Konvektion (STENSRUD, 2007, S. 186f). Hochreichende Konvektion kann bereits teilweise in Wettermodellen aufgelöst werden. Dagegen wird flache Konvektion häufig über Parametrisierungen, die auf nicht-lokalen Massenflussansätzen beruhen, berücksichtigt. Die grundlegenden Ideen dazu werden z.B. in MIRONOV (2009, S. 190ff) oder STEVENS (2005, S. 626f) aufgezeigt. Diese Ansätze basieren letztlich ebenfalls auf (abgebrochenen) Bilanzgleichungen von statistischen Momenten höherer Ordnung, wobei sich Analogien zwischen den Bilanzen im Rahmen der Massenflussansätze und der Schließung zweiter Ordnung finden lassen (MIRONOV, 2009, S. 195ff).

Neben den Basiskonzepten (Schließung zweiter Ordnung und Massenflussansätze) haben sich zahlreiche Kombinationen beider Ansätze entwickelt, wobei eine Vereinheitlichung beider Ansätze angestrebt wird (z.B. LAPPEN und RANDALL, 2001; SOARES *et al.*, 2004). Die Frage, welches Basiskonzept sich besser als Grundlage zur vereinheitlichten Beschreibung von Turbulenz und Konvektion eignet, beantwortet MIRONOV (2009, S. 206) zugunsten der Schließung zweiter Ordnung. Er argumentiert, dass auf längere Sicht die Gitterweiten von Wettervorhersagemodellen weiter sinken, weil die Rechnerkapazitäten stiegen. Damit würden dann immer mehr größerskalige, organisierte Strömungsstrukturen und damit auch flache Konvektion vom Modell aufgelöst. Dies führe dazu, dass sich der Fokus immer wei-

ter auf die Parametrisierung von kleinskaligeren, turbulenten Strukturen verschöbe, wofür sich die Schließung zweiter Ordnung als Basis in besonderem Maße eigne.

Turbulenzmodelle stellen vereinfachte und idealisierte Beschreibungen von komplexen physikalischen Prozessen dar und sollen das wesentliche Verhalten der Turbulenz wiedergeben (STENSRUD, 2007, S. 9). Dennoch müssen sie nicht zwangsläufig den tatsächlichen physikalischen Prozess simulieren, um die zu modellierenden Terme realistisch wiederzugeben (PIELKE, 2002, S. 164). Letztlich kommt es insbesondere beim Einsatz von Turbulenzmodellen in der (operationellen) Wettervorhersage darauf an, Turbulenzparametrisierungen zu verwenden, die einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und den vorhandenen rechen-technischen Ressourcen liefern (z.B. MIRONOV, 2009, S. 164; PIELKE, 2002, S. 164).

1.2 Grenzschichten mit Wolken

Die atmosphärische Grenzschicht ist häufig mit Wolken bedeckt. Dabei modifizieren Wolken die Grenzschicht durch Abschattung der Erdoberfläche, Reflektion und Absorption von solarer Strahlung und Freisetzen latenter Wärme (LENSCHOW, 1998, S. 185). Vor allem stratiforme Bewölkung hat einen großen Einfluss auf den Strahlungshaushalt der Erde (RANDALL *et al.*, 1984). Die Grenzschichtbewölkung als solche kann prinzipiell in drei Typen unterteilt werden: Kumulus, Stratokumulus und Stratus. Dabei wird der Zustand einer bewölkten Grenzschicht allgemein durch das Zusammenspiel von strahlungsbedingter Abkühlung, Einmischen warmer Luft aus Bereichen oberhalb der Wolkenschicht (*Entrainment*), großräumigem Absinken und turbulenten Auftriebsflüssen bestimmt (GARRAT, 1992, S. 193).

Bewölkte Grenzschichten treten in vielen Regionen der Erde auf, welche bei GARRAT (1992, S. 198) übersichtlich zusammengefasst werden. Über dem Meer in der Passatwindregion werden häufig Grenzschichten angetroffen, die mit flachem Kumulus und Stratokumulus bedeckt sind. Stratokumulus lässt sich auch verbreitet in den mittleren Breiten antreffen, z.B. verbunden mit Hochdruckwetterlagen in kälteren Monaten oder in Küstennähe. Auch flache Kumuluswolken können sich über Land als Folge von Erwärmung des Bodens durch solare Einstrahlung ausbilden. Kaltluftausbrüche stellen ein weiteres Phänomen dar, dass auch mit dem Vorhandensein von Kumulus- und Stratokumulusbedeckten Grenzschichten verknüpft ist. Grenzschichten mit Stratus werden hauptsächlich in polaren Regionen während der Sommermonate beobachtet. Im Zentrum dieser Arbeit stehen vor allem die mit Kumulus- und Stratokumulusbedeckten Grenzschichten in der Passatwindregion, die sich großflächig über dem Meer ausbilden und daher auch für die Wettervorhersage von Interesse sind. Im Folgenden liegt das Hauptaugenmerk deshalb auf der Beschreibung dieser Grenzschichten.

Flache Kumuluskonvektion ist in der Passatwindregion allgegenwärtig und stellt im Prinzip die Grundform von feuchter atmosphärischer Konvektion dar (STEVENS, 2005). Durch die Konvektion von flachem Kumulus wird die Mischung von Wärme und Feuchte intensiviert, welches zu einer Zunahme der Verdunstung an der Ozeanoberfläche führt (TIEDTKE *et al.*, 1988). Die sich dadurch erhöhende Feuchte der Grenzschicht wird mittels der Passatwinde in Richtung der innertropischen Konvergenzzone transportiert, wo sie als latente Wärme bei der Bildung hochreichender Konvektion frei wird und so die Zirkulation der Hadley-Zelle unterstützt (SIEBESMA, 1998, S. 441).

Der prinzipielle Aufbau einer Grenzschicht mit flachem Kumulus ist Abb. 1.1 zu entnehmen. Die Grenzschicht lässt sich durch eine bodennahe Prandtl-Schicht (engl.: *surface layer*) mit einer darüber liegenden gut durchmischten Schicht charakterisieren. Eine feucht-

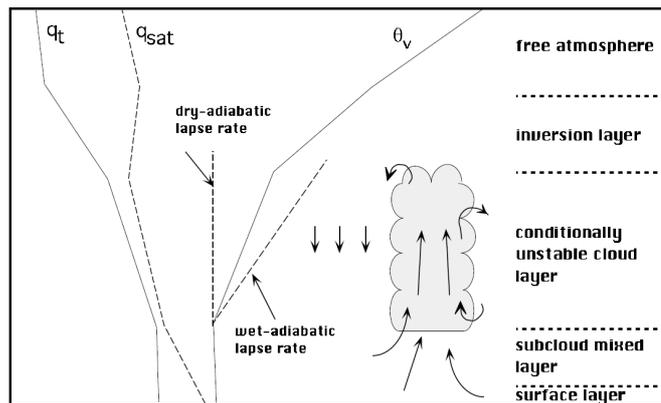


Abbildung 1.1: Schematischer Aufbau einer mit flachem Kumulus bewölkten Grenzschicht aus HEUS *et al.* (2010). θ_v ist das Profil der virtuellen potentiellen Temperatur. q_t stellt die gesamte spezifische Feuchte dar und q_{sat} ihren entsprechenden Sättigungswert.

labile (engl.: *conditionally unstable*) Schicht schließt sich an, in der sich die Kumuluswolken ausbilden können. Bei einer feucht-labilen Schichtung ist ein ungesättigtes Luftpaket stabil gegenüber Vertikalbewegungen, wohingegen ein gesättigtes Luftpaket labil ist (STULL, 1988, S. 547). Die Kumulusbewölkung besteht aus vereinzelt Wolken, sodass sich in der Passatwindregion häufig ein Bedeckungsgrad von weniger als 10% einstellt. Die vertikale Mächtigkeit der Wolken kann bis zu 2 km betragen und wird durch eine Inversionsschicht, die sich an die Wolkenschicht anschließt und eine Mächtigkeit von einigen hundert Metern besitzt, begrenzt (STEVENS, 2005). Die Wolken bilden sich gewöhnlicherweise oberhalb von in der ungesättigten Mischungsschicht aufsteigenden Warmluftblasen, die durch Erwärmung der Oberfläche entstehen (STULL, 1988, S. 552ff). Aufgrund der im Vergleich zu hochreichender Konvektion kurzen Lebenszeit von flachen Kumuluswolken und der geringen Mächtigkeit, fällt in der Regel kein Niederschlag aus (BETTS, 1973). Auch ist die spezifische Feuchte in der Wolkenschicht kleiner als ihr Sättigungswert q_{sat} (siehe Abb. 1.1), sodass die Schicht im Mittel ungesättigt ist.

Neben der flachen Kumulusbewölkung stellt auch der Stratokumulus eine Grundform von Feuchtkonvektion dar (STEVENS, 2005). Großflächige Stratokumulusbewölkung, wie sie häufig über den Ozeanen in den Subtropen auftritt, beeinflusst den Strahlungshaushalt der Erde (HARTMANN *et al.*, 1992). Dabei erhöht das Vorhandensein einer Stratokumuluschicht die Albedo, wodurch weniger solare Strahlung die Oberfläche erreicht. Die Wolkenschicht beeinflusst aber die von der Erde abgegebene langwellige Ausstrahlung kaum. Folglich kann die Stratokumuluschicht den Eintrag von Netto-Strahlung reduzieren und hat einen abkühlenden Effekt (RAMANATHAN *et al.*, 1989).

Unter Stratokumulusbewölkung wird eine stratiforme Bewölkung verstanden, in der zelluläre Strukturen eingebettet sind. Sie bedeckt den Himmel häufig komplett mit einer Dicke von einigen hundert Metern (STEVENS, 2005). Eine Stratokumulus bedeckte Grenzschicht besteht im Idealfall aus einer gut durchmischten Schicht, in der die Stratokumulusbewölkung enthalten ist (siehe Abb. 1.2). Abgeschlossen wird die Grenzschicht durch eine starke Inversion, wobei Temperatursprünge von 10 K über 100 m nicht untypisch sind (HEUS *et al.*, 2010). Im Gegensatz zur Kumuluschicht ist die Stratokumuluschicht gesättigt, welches in Abb. 1.2 daran zu erkennen ist, dass die Feuchte q_t in der Wolkenschicht größer als ihr Sättigungswert ist. Angetrieben wird die Grenzschicht

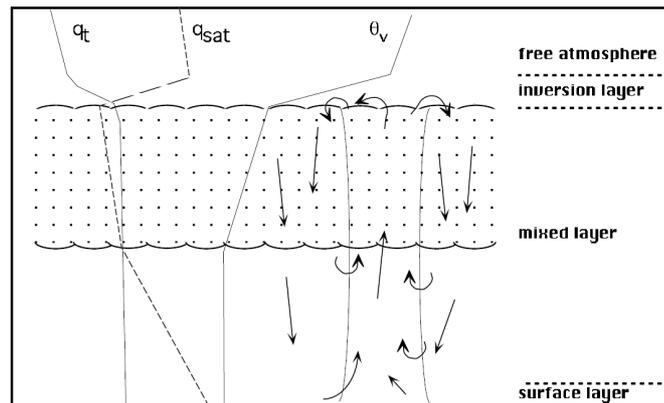


Abbildung 1.2: Wie Abb. 1.1 aber für eine mit Stratokumulus bewölkte Grenzschicht. Die Abbildung entstammt HEUS *et al.* (2010).

hauptsächlich durch langwellige Strahlungsabkühlung am Oberrand der Wolkenschicht (z.B. DUYNKERKE *et al.*, 1995). Die Stratokumulusschicht verhält sich effektiv wie ein schwarzer Strahler, weil die Wolkentropfen effiziente Absorber bzw. Emittoren im langwelligen Strahlungsbereich sind (STULL, 1988, S. 557). Dies führt dazu, dass die langwellige Ausstrahlung am Wolkenoberrand größer als die langwellige Einstrahlung ist und sich somit die Wolkenschicht am Oberrand strahlungsbedingt abkühlt. Folglich setzt konvektive Instabilität ein, weil sich kältere Luftmassen über wärmeren befinden. Diese Instabilität wird durch turbulente Bewegungen ausgeglichen, indem Abwinde die kälteren Luftmassen nach unten bringen, welches mit kompensierenden warmen Aufwinden verbunden ist (DUYNKERKE, 1997, S. 205f). Durch Turbulenz wird am Wolkenoberrand auch Entrainment von wärmerer, trockenerer Luft in die Wolkenschicht angestoßen, welches zum Verdunsten von Wolkentropfen führt. Die sich durch Verdunstung ergebende Abkühlung kann die Luftschichten weiter abkühlen und so die Turbulenz weiter verstärken, sodass sich ein selbstverstärkender Prozess etablieren kann, der auch als *Cloud-top Entrainment Instability* (CTEI) bekannt ist und zum Aufbrechen der Wolkenschicht führen kann (z.B. STULL, 1988, S. 558f). Einen weiteren Faktor, der das Aufbrechen begünstigt, stellt die Entkopplung (engl.: *decoupling*) dar, bei der sich die Wolkenschicht von der trockenen Grenzschicht abkoppelt. Als mögliche Ursachen dafür werden zum einen der Ausfall von Niederschlag und zum anderen die Absorption von solarer Strahlung genannt (STEVENS, 2005).

1.3 Stand der Forschung

Turbulenzmodelle basieren, wie in Kap. 1.1 beschrieben, auf Bilanzgleichungen von statistischen Momenten höherer Ordnung. Damit besitzen die Bilanzgleichungen als Basis von Turbulenzmodellen eine zentrale und fundamentale Bedeutung. Nur bei genauer Kenntnis der Prozesse in der atmosphärischen Grenzschicht, wozu auch Feuchtkonvektion zählt, ist eine Weiterentwicklung und Verbesserung von Turbulenzmodellen möglich. Daher werden zunächst Studien diskutiert, die sich mit Bilanzen von Momenten höherer Ordnung vor allem in der bewölkten Grenzschicht befassen. Im Anschluss geht es um die Modellierung von Turbulenz im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung, welche eine weit verbreitete Herangehensweise zur Parametrisierung von Turbulenz darstellt. Eine der zentralen Aufgaben bei der Schließung zweiter Ordnung stellt die Modellierung von Druck-Geschwindigkeits-

und Druck-Skalar-Kovarianzen dar, auf die daher ausführlicher eingegangen wird.

In der atmosphärischen Grenzschicht werden Bilanzen von Momenten höherer Ordnung zum einen mit Messdaten und zum anderen mit turbulenzauflösenden Modellen wie Large-Eddy Simulation (LES, siehe auch Kap. 2.1) untersucht. Dabei sind bisher vor allem die turbulente kinetische Energie (TKE) als Maß für die Stärke der Turbulenz und ihre Bilanz Gegenstand vieler Untersuchungen. Symbolisch lässt sich die Bilanz über $\partial \text{TKE} / \partial t = B + S + T_t + T_p + D$ darstellen (siehe Kap. 3.1.2). Die zeitliche Änderung der TKE ergibt sich über die Produktion bzw. Vernichtung von TKE durch Auftrieb (B) und Scherung (S), den turbulenten Transport (T_t) und den Transport durch Druckfluktuationen (T_p) sowie die Dissipation (D), die TKE über molekulare Reibung in Wärme umwandelt. Aus Messungen, die 1968 im Rahmen des Kansas-Experiments durchgeführt wurden, ermittelten WYNGAARD und COTÉ (1971) erstmals die Bilanz der TKE in der bodennahen Prandtl-Schicht. Messungen von Bilanztermen der TKE über die gesamte konvektive Grenzschicht wurden erstmals von LENSCHOW (1974) durchgeführt. Die erste LES zur Untersuchung der TKE-Bilanz von DEARDORFF (1974b) sowie zahlreiche weitere Messungen (z.B. LENSCHOW *et al.*, 1980; HORST *et al.*, 2004) und LES-Studien (z.B. MASON, 1989; MIRONOV *et al.*, 2000) der scherungsfreien konvektiven Grenzschicht zeigen, dass über den größten Teil der Grenzschicht Turbulenz durch Auftrieb B produziert und über Dissipation D vernichtet wird. Außerdem hat der turbulente Transport T_t eine größere Bedeutung als der Transport durch Druckfluktuationen T_p , die beide die TKE umverteilen. Weht in der konvektiven Grenzschicht ein mittlerer Wind, wird zusätzlich noch TKE durch Scherung S vor allem in Bodennähe und in der Entrainmentzone produziert. Dann nimmt auch die Dissipation zu, um die zusätzlich zum Auftrieb wirkende Produktion durch Scherung auszugleichen (z.B. CONZEMIUS und FEDOROVICH, 2006; PINO und DE ARELLANO, 2008).

Messungen der TKE-Bilanz von Kumulus- und Stratokumulus-bedeckten Grenzschichten (NICHOLLS und LEMONE, 1982; BROST *et al.*, 1982) sowie LES von flachem Kumulus (CUIJPERS *et al.*, 1996; GRANT und LOCK, 2004) und Stratokumulus (DEARDORFF, 1980; MOENG, 1986) zeigen, dass die Bilanzterme in der wolkenfreien Mischungsschicht kaum Veränderungen gegenüber einer trockenen Grenzschicht zeigen. Im Zentrum der Wolkenschicht wird TKE durch Auftrieb B produziert, wohingegen der Auftriebsterm an der Wolkenbasis und am Oberrand der Wolkenschicht zum Verlustterm wird. Dort gleicht der Transport durch Druckfluktuationen T_p den Verlust durch Auftrieb aus.

Neben der TKE sind auch die turbulenten skalaren Flüsse für die Beschreibung von Turbulenz von Bedeutung. Ein vertikaler skalarer Fluss der Temperatur WT ändert sich zeitlich über $\partial \text{WT} / \partial t = G + B + T_t + P$ (siehe Kap. 3.1.3), wobei G die Produktion oder Vernichtung von WS durch den mittleren Gradienten, B den Einfluss von Auftrieb, T_t den turbulenten Transport und P die Druck-Skalar-Kovarianz beschreiben. Die Bilanz des vertikalen Temperaturflusses in der Mitte der konvektiven Grenzschicht zeigt, dass Auftrieb B, turbulenter Transport T_t und Druck-Skalar-Kovarianz P ähnlich bedeutend sind (z.B. LENSCHOW *et al.*, 1980; MOENG und WYNGAARD, 1989). Im Fall von flacher Bewölkung verhalten sich die Bilanzen der Flüsse unterhalb der Wolkenschicht wie im Fall einer trockenen Grenzschicht. Innerhalb der Wolkenschicht wird die Produktion durch Auftrieb B durch den mittleren Gradiententerm G sowie die Druck-Skalar-Kovarianz P ausgeglichen, wobei sich nahezu eine Spiegelbildlichkeit von Auftriebsproduktion- und Druck-Skalar-Kovarianz einstellt (MOENG, 1986; CUIJPERS *et al.*, 1996).

Eine weitere Klasse an Momenten zweiter Ordnung stellen die skalaren Varianzen und die Kovarianz von Temperatur und Feuchte dar, deren Bilanzen für bewölkte Grenzschicht-

ten bisher kaum untersucht worden sind. Eine symbolische Form der Bilanz der Temperaturvarianz TT lautet $\partial TT/\partial t = G + T_t + D$ (siehe Kap. 3.1.4). Die Varianz TT ergibt sich aufgrund des Einflusses der Produktion durch den mittleren Gradienten G , des turbulenten Transports T_t sowie der Vernichtung durch die Dissipation D . In der Mitte der trockenen konvektiven Grenzschicht stellt sich ein Gleichgewicht von Dissipation D und turbulentem Transport T_t ein. Am Unter- und Oberrand der Grenzschicht wird Varianz vor allem durch den mittleren Gradienten produziert und von der Dissipation ausgeglichen (z.B. MOENG und WYNGAARD, 1989; MIRONOV *et al.*, 2000). Innerhalb von Wolkenschichten mit flachem Kumulus stellt sich bei den Bilanzen der skalaren Varianzen ein Gleichgewicht zwischen Produktion und Dissipation ein. Der turbulente Transport macht sich vor allem an der Wolkenbasis und am Wolkenoberrand bemerkbar, indem er am Oberrand Basis Varianz lokal produziert und an der Basis vernichtet (DE ROODE und BRETHERTON, 2003; NEGGERS, 2009).

Die Bilanzen der Impulsflüsse in der atmosphärischen Grenzschicht wurden bisher ebenfalls selten diskutiert. Sie lassen sich symbolisch für den vertikalen Impulsfluss WU mittels $\partial WU/\partial t = G + B + T_t + T_p + P + D$ darstellen (siehe Kap. 3.1.1). Die zeitliche Änderung von WU ergibt sich durch das Zusammenspiel von Produktion oder Vernichtung durch mittlere Gradienten (Scherung) G , Auftrieb B , Transporte durch Turbulenz T_t und Druckfluktuationen T_p , der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz P sowie der Dissipation D . Es zeigt sich, dass bei den vertikalen Impulsflüssen in einer konvektiven Grenzschicht mit signifikantem mittleren Wind hauptsächlich Scherungsproduktion G und Vernichtung durch Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen P im Gleichgewicht stehen. Turbulenter Transport und Auftrieb haben nur einen geringen Einfluss (WYNGAARD, 2010, S. 250). Diese Beobachtung wird auch für Stratokumulus bedeckte Grenzschichten (BROST *et al.*, 1982) sowie hochreichende Kumulus-Konvektion (KHAIROUTDINOV und RANDALL, 2002) gemacht.

Die Untersuchung von Bilanzen der Momente dritter Ordnung konzentriert sich hauptsächlich auf die Bilanz der Schiefe der Vertikalgeschwindigkeit. Das Interesse an der Schiefe liegt darin begründet, dass Bilanzgleichungen der Schiefe in einige Parametrisierungen eingehen (GOLAZ *et al.*, 2005).

Bisher gibt es wenige Studien, die die Bilanzen der Momente zweiter Ordnung für konvektive Grenzschichten systematisch und umfassend untersuchen. Zu diesen Studien zählen die Untersuchung einer trockenen Grenzschicht ohne mittleren Wind von MIRONOV *et al.* (2000) und mit mittlerem Wind von DEARDORFF (1974a,b), die Studie einer Kumulus bedeckten Grenzschicht von CUIJPERS *et al.* (1996) sowie die Diskussion von Bilanzen einer Grenzschicht mit Stratokumulus von MOENG (1986). Bilanzen von Momenten zweiter Ordnung für hochreichende Konvektion werden bei KHAIROUTDINOV und RANDALL (2002) diskutiert. Die Bilanzen von horizontalen turbulenten Flüssen werden bisher hauptsächlich in der bodennahen Prandtl-Schicht untersucht (z.B. WILCZAK und BEDARD, 2004; BRADLEY *et al.*, 1982) und nicht in der gesamten konvektiven Grenzschicht.

Wie bereits in Kap. 1.1 erwähnt, werden im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung gelöst. Die darin enthaltenen Druckterme, Momente dritter Ordnung und Dissipationsraten müssen mittels der bekannten Momente erster und zweiter Ordnung ausgedrückt werden, um das Gleichungssystem zu schließen. Es wurden bisher sehr viele Schließungsansätze unterschiedlicher Komplexität entwickelt. So zitiert STULL (1988, S. 201) Donaldson (1973), der sinngemäß sagt, dass es mehr Modelle auf der Stufe der Momente zweiter Ordnung zum Schließen der Bewegungsgleichungen gibt als Entwickler, die an Turbulenzparametrisierungen arbeiten. Dies äußert sich auch in einer umfangreichen Literatur, die zu diesem Thema verfügbar ist.

Allgemeine Übersichtsartikel zu Turbulenzmodellen lassen sich z.B. bei LUMLEY (1978); POPE (2000); LAUNDER (2005) und HANJALIĆ und LAUNDER (2011) finden. Parametrisierungen im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung für geophysikalische Anwendungen werden z.B. in UMLAUF und BURCHARD (2005); STENSRUD (2007) und MIRONOV (2009) übersichtlich diskutiert.

Als grundlegende Voraussetzung sollten Turbulenzparametrisierungen einige physikalische und mathematische Bedingungen erfüllen, damit sie plausibel sind. Dazu zählt, dass die Parametrisierungen dieselbe Einheit und dieselben Tensoreigenschaften wie die zu parametrisierende Größe aufweisen (z.B. STULL, 1988, S. 201). Zusätzlich dazu sollten Parametrisierung noch die Bedingung der Realisierbarkeit erfüllen. Diese Bedingung geht auf SCHUMANN (1977) und LUMLEY (1978) zurück und besagt, dass alle turbulenten Momente die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung erfüllen sollten. Damit wird sichergestellt, dass z.B. die TKE positiv definit ist und Korrelationskoeffizienten nicht größer als Eins werden können (z.B. HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S.61).

Die größte Herausforderung bei der Modellierung zweiter Ordnung stellt die Parametrisierung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen dar, weil sich der Einfluss von turbulenten Druckfluktuationen im ganzen Strömungsfeld über wellenförmiges Ausbreiten bemerkbar macht und damit Druckfluktuationen nicht-lokale Auswirkungen haben (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 63). Diese nicht-lokalen Eigenschaften machen sich auch in der Bestimmungsgleichung für die Druckfluktuationen bemerkbar, die sich aus der Divergenz der Bewegungsgleichung und Umstellen nach dem Druckterm zu einer elliptischen Poissongleichung für die Druckfluktuation ergibt (siehe auch Kap. 3.2). Die Lösung dieser Differentialgleichung kann explizit mittels der Greenschen Funktion angegeben werden (POPE, 2000, S. 19). CHOU (1945) zeigt, dass diese Lösung benutzt werden kann, um die Kovarianzen aus Druck und Geschwindigkeit bzw. Druck und Skalar mittels Zwei-Punkt Geschwindigkeitskorrelationen auszudrücken. Daraus ergibt sich dann, dass die Druck-Kovarianzen in verschiedene Anteile zerlegt werden können. Es stellen sich Anteile auf Grund von turbulenten Interaktionen, mittlerer Scherung, Auftrieb und Corioliseffekten ein. Die allgemeine Vorgehensweise zur Modellierung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen besteht nun darin, die Kovarianzen zu zerlegen und die einzelnen Anteile separat zu modellieren (z.B. POPE, 2000, S. 390f; HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 63ff). Dabei wird für gewöhnlich angenommen, dass die Zwei-Punkt-Korrelationen nur in der Nähe des Punktes von Null verschieden sind, an dem der Druck ausgewertet wird. Damit können die Kovarianzen so modelliert werden, als wären sie lokal, also nur von Strömungsvariablen am selben Punkt abhängig (z.B. POPE, 2000, S. 458; MIRONOV, 2009, S. 170).

Die Wirkung der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen kann am Beispiel einer Strömung verdeutlicht werden, in der hauptsächlich Auftrieb für die Produktion von Turbulenz verantwortlich ist. In diesem Fall erzeugt Auftrieb vertikale Geschwindigkeitsfluktuationen. Der Druckterm verteilt TKE von der vertikalen Komponente zu den horizontalen Komponenten um und sorgt damit für einen Ausgleich (z.B. MOENG, 1998). Dieser Term wird daher im Englischen auch als *return-to-isotropy* Term bezeichnet, weil er ausgleichend wirkt und die Strömung in Richtung eines isotropen Zustands zurückführt (z.B. STULL, 1988, S. 123).

Die erste Parametrisierung für die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen stellt ROTTA (1951) auf, der die soeben beschriebene Wirkung erkannt hat. Allerdings weist er diese Parametrisierung der totalen Kovarianz zu und nicht nur dem Anteil durch turbulente Interaktionen, wie es von LAUNDER *et al.* (1975) gemacht wird. Für den Anteil durch

mittlere Scherung wird zum ersten Mal von NAOT *et al.* (1970) ein Modell vorgeschlagen. Es beruht ebenfalls auf dem Gedanken, dass der Scherungsanteil der Kovarianz die durch mittlere Scherung erzeugte Anisotropie ausgleicht. Analog dazu nehmen LAUNDER *et al.* (1975) dies auch für den Auftriebsanteil an und stellen das sog. Basismodell für die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen auf. Das Basismodell ist linear in den Momenten zweiter Ordnung und wird so in geophysikalischen Modellen verwendet (vgl. z.B. ZEMAN, 1981; UMLAUF und BURCHARD, 2005). Darüber hinaus haben sich viele weitere Modelle für die Druck-Kovarianzen entwickelt, die in der Regel nicht-lineare Terme beinhalten (z.B. CRAFT *et al.*, 1996; LUMLEY, 1978; RISTORCELLI *et al.*, 1995). Gewöhnlich liefern diese nicht-linearen Modelle bessere Ergebnisse als die vereinfachten linearen Ansätze, vor allem in Situationen, in denen die Strömung stark vom isotropen Zustand abweicht. Sie sind allerdings auch umständlicher zu benutzen und rechenintensiv, sodass in geophysikalischen Modellen für gewöhnlich nur lineare Modelle verwendet werden (MIRONOV, 2009, S. 170).

Zur Überprüfung der generellen Eignung von verwendeten Turbulenzparametrisierungen und zur Bestimmung von (empirischen) Modellierungskonstanten werden Messungen oder Ergebnisse turbulenzauflösender Simulationen wie LES herangezogen. Die direkte Messung von Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen in der atmosphärischen Grenzschicht ist schwierig, weil die atmosphärischen Druckfluktuationen im Vergleich zum mittleren Druck sehr klein sind. Druckmesssonden sind anfällig dafür, dass zu messende Druckfeld zu stören und damit die Messungen zu verfälschen (WILCZAK und BEDARD, 2004; WILCZAK, 1984). Daher wurden in frühen Arbeiten die Druck-Kovarianz-Terme indirekt als Residuum von Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung bestimmt (z.B. WYNGAARD und COTÉ, 1971; LENSCHOW *et al.*, 1980). Problematisch an dieser Vorgehensweise ist, dass das Residuum dann auch die akkumulierten Messfehler enthält, die zum Teil sehr groß sein können (STULL, 1988, S. 163). Die erste direkte Messung der horizontalen Temperatur-Druckgradient-Kovarianz in der Prandtl-Schicht gelang WILCZAK und BEDARD (2004) unter Verwendung von Mikrobarometern, die auf einem Artikel von NISHIYAMA und BEDARD (1991) basieren. NGUYEN *et al.* (2012) präsentieren erstmals Messungen aller Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen in der Prandtl-Schicht, die im Rahmen der *Advection Horizontal Array Turbulence Study* (AHATS) erzielt wurden. Informationen über die vertikale Änderung der Druckterme in der gesamten Grenzschicht wurden bisher nur mittels LES erhalten. So überprüfen MIRONOV (2001) und MOENG und WYNGAARD (1986) gängige Parametrisierungen der Druck-Skalar-Kovarianzen in der konvektiven Grenzschicht und ANDRÉN und MOENG (1993) in der neutralen Grenzschicht mit LES. Überprüfungen für bewölkte Grenzschichten hingegen stehen noch aus. An dieser Stelle sei auch darauf hingewiesen, dass es mittels Messungen nicht möglich ist, die oben beschriebene Zerlegung der Druck-Kovarianzen zu bestimmen. Der Grund dafür liegt darin, dass bisher keine Detektoren existieren, die die einzelnen Anteile bestimmen könnten. Daher kommen zur Überprüfung der Ansätze für die Kovarianzen nur turbulenzauflösende Simulationen in Frage.

Zusätzlich zu den Druck-Kovarianzen müssen im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung auch Momente dritter Ordnung parametrisiert werden. Diese Korrelationen aus drei fluktuierenden Größen gehen als Divergenzen, also Ableitungen der Momente dritter Ordnung, in die Bilanzgleichungen ein. Sie sorgen für einen turbulenten Transport der jeweiligen turbulenten Größe und verschwinden bei der Integration über die gesamte Grenzschicht. Diese Dreifachkorrelationen werden in mesoskaligen Modellen häufig über einfache Gradientansätze berücksichtigt (MIRONOV, 2009, S. 171). Beim Gradientansatz werden die Dreifachkorrelationen über ein Produkt von Diffusionskoeffizient und negativem Gra-

dienten der entsprechenden Momente zweiter Ordnung angenähert. Allerdings zeigen z.B. MOENG und WYNGAARD (1989) und MIRONOV *et al.* (2000), dass diese Schließung den Transport in der konvektiven Grenzschicht unterschätzt, weil sie den Einfluss des Auftriebs auf den Transport unberücksichtigt lässt. Um diese nicht-lokalen Eigenschaften des konvektiven Transports zu berücksichtigen, werden z.B. Parametrisierungen für die Dreifachkorrelationen verwendet, die von der Schiefe abhängen (MIRONOV, 2009, S. 173).

Als dritte Klasse an Termen, die es zu modellieren gilt, verbleiben die Dissipationsraten. Dabei wird basierend auf KOLMOGOROV (1941) angenommen, dass die Dissipation in den kleinen Skalen stattfindet, auf denen Isotropie herrscht (siehe auch Kap. 2.1). Daher werden die Dissipationsraten in den Impulsflussbilanzgleichungen mit Hilfe der TKE-Dissipationsrate beschrieben und die Dissipationsraten in den skalaren Bilanzgleichungen vernachlässigt (z.B. HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 74). Die Modellierung der Dissipationsraten erfolgt häufig entweder über das Lösen entsprechender prognostischer Gleichungen für die Dissipationsraten der TKE sowie der skalaren Varianzen, oder aber über algebraische Ausdrücke, in denen die TKE und eine turbulente Längenskala einfließen. Diese Längenskala muss dann wiederum parametrisiert werden (MIRONOV, 2009, S. 175f). Über die Dissipationsraten an sich werden verschiedene Längen- und Zeitskalen definiert, die in die Modellierung anderer Terme einfließen, sodass sich die Dissipationsraten indirekt auf viele Terme auswirken (ZEMAN, 1981).

Die soeben beschriebene Schließung zweiter Ordnung erfordert das Lösen von prognostischen Gleichungen für alle Momente zweiter Ordnung. Dies ist aber häufig zu komplex und rechenintensiv für die Anwendungen in der numerischen Wettervorhersage, sodass Vereinfachungen notwendig sind (MIRONOV, 2009, S. 177). Vereinfachungen werden über das Abbrechen der Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung erzielt, welches durch Vernachlässigung gewisser Terme in den Gleichungen umgesetzt wird. MELLOR und YAMADA (1974) haben eine Übersicht über die verschiedenen Möglichkeiten, die Bilanzgleichungen zu vereinfachen, erstellt und die entstandenen Schließungen hierarchisch geordnet. Die Schließungen reichen von der kompletten Schließung zweiter Ordnung, also dem Lösen aller prognostischen Gleichungen der Momente zweiter Ordnung, bis hin zu einem algebraischen Modell, in dem die Bilanzgleichungen zu diagnostischen Ausdrücken reduziert werden. Die Schließung auf dem Level 2.5 nach MELLOR und YAMADA (1974) ist in der praktischen Anwendung sehr beliebt (MIRONOV, 2009, S. 177). Dabei entspricht dies einer Schließung 1.5-facher Ordnung, bei der eine prognostische Gleichung für die TKE gelöst wird und in den Bilanzen der anderen Momente zweiter Ordnung die zeitliche Änderung, die Advektion und die turbulente Diffusion vernachlässigt werden, sodass sich algebraische Ausdrücke ergeben. Als Beispiel für die Anwendung sei hier das operationelle COSMO-Modell (BUZZI *et al.*, 2011) des Deutschen Wetterdienstes genannt.

Die Erkenntnis, dass ein größeres Verständnis notwendig ist, um Prozesse innerhalb der Wolken zu verstehen und damit auch ihre Repräsentanz in Wetter- und Klimamodellen zu verbessern, führte 1992 zur Bildung der GEWEX Cloud System Study (GCSS) (GEWEX CLOUD SYSTEM SCIENCE TEAM, 1993). Dabei steht GEWEX für *Global Energy and Water Cycle Experiment*, ein Programm des *World Climate Research Programme* (WCRP) (siehe z.B. SOROOSHIAN *et al.*, 2005). Innerhalb des GCSS haben sich verschiedene Arbeitsgruppen gebildet, um unterschiedliche Wolkentypen zu untersuchen. Die Arbeitsgruppe für Grenzschichtbewölkung² beschäftigt sich vorrangig mit der Verbesserung von Parametrisierungen bewölkter Grenzschichten. Dazu führt sie u.a. Vergleiche zwischen

²Übersicht über Vorhaben der Arbeitsgruppe für Grenzschichtbewölkung:
<http://www.knmi.nl/~siebesma/BLCWG/>

verschiedenen Modellen durch, um die Abhängigkeit von Ergebnissen von einem Modell zu reduzieren und damit die Robustheit erzielter Ergebnisse sicherzustellen.

1.4 Fragestellungen und Struktur dieser Arbeit

Die Bilanzen der statistischen Momente zweiter Ordnung haben für die Modellierung von Turbulenz eine grundlegende Bedeutung, weil viele Turbulenzparametrisierungen auf den (abgebrochenen) Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung basieren. Folglich ist nur bei gründlicher Kenntnis der Bilanzen eine Weiterentwicklung der Modelle möglich. Da Turbulenz ein dreidimensionales Phänomen ist, sind die Bilanzen aller Momente zweiter Ordnung miteinander gekoppelt. Folglich ist auch eine Analyse der Bilanzen aller Momente zweiter Ordnung notwendig, um die Auswirkungen von Turbulenz im Hinblick auf Parametrisierungen zu verstehen. Wie aus dem vorherigen Abschnitt 1.3 hervorgeht, gibt es zwar viele Studien, die sich mit der TKE-Bilanz auseinandersetzen, aber nur wenige Studien, die die Bilanzen der Momente zweiter Ordnung, insbesondere für bewölkte Grenzschichten, systematisch und vollständig untersuchen. Daher wird der Fokus in dieser Arbeit auf die vollständige Bestimmung und Untersuchung der Bilanzen der Momente zweiter Ordnung gelegt. Als Methode kommt dabei die numerische Simulation mit einem turbulenzauflösenden Large-Eddy Simulationsmodell zum Einsatz, mit dem die für diese Untersuchung erforderlichen Momente höherer Ordnung bestimmt werden können. In dieser Arbeit stehen bewölkte Grenzschichten im Vordergrund. Da die atmosphärische Grenzschicht häufig mit Wolken bedeckt ist, stellen bewölkte Grenzschichten z.B. auch in der numerischen Wettervorhersage einen wiederkehrenden, realistischen Fall dar. Dabei werden die beiden häufig vorkommenden Grundtypen flacher Konvektion, Kumulus und Stratokumulus, untersucht, um Bilanzen bewölkter Grenzschichten aufzustellen. Damit ergibt sich die erste von zwei Fragestellungen, die Gegenstand dieser Arbeit sind: **Wie sehen die Bilanzen der Momente zweiter Ordnung bei Feuchtkonvektion aus?**

Bei der Schließung zweiter Ordnung, welche im Allgemeinen die Basis für Turbulenzparametrisierungen in Wetter- und Klimamodellen darstellt, ist die Modellierung von Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen von zentraler Bedeutung. Allerdings wurden Parametrisierungen für diese Terme bisher nur in trockenen Grenzschichten auf allgemeine Tauglichkeit und zur Bestimmung von Modellierungskonstanten untersucht. Diese Untersuchung wird in der vorliegenden Arbeit erweitert, indem gängige Parametrisierungen der Druckterme für bewölkte Grenzschichten mit LES-Daten verglichen werden und daraus Schlüsse für die Modellierung gezogen werden. Dabei wird die spezielle Stärke einer turbulenzauflösenden Simulationstechnik wie LES genutzt, weil nur mit solch einer Technik die Druckterme in ihre einzelnen Anteile zerlegt werden können und ein komponentenweiser Vergleich mit Parametrisierungen überhaupt möglich ist. Als zweite zentrale Fragestellung dieser Arbeit ergibt sich also die Frage: **Wie verhalten sich gängige Parametrisierungen für Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen bei Vorhandensein von Bewölkung?**

Zur Beantwortung dieser zwei Fragestellungen wird zunächst in Kapitel 2 das in der vorliegenden Arbeit verwendete Large-Eddy Simulationsmodell vorgestellt. Nach Betrachtung der grundlegenden Gleichungen und Schließungsannahmen wird auf die verwendete Numerik sowie die Rand- und Anfangsbedingungen eingegangen. Die Bestimmung von Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung sowie die Zerlegung der Druck-Kovarianz-Terme im LES-Modell wird in Kapitel 3 behandelt. In Kapitel 4 werden die in dieser Arbeit simulierten Grenzschichten vorgestellt und Ergebnissen von Modellvergleichsstudi-

en gegenüber gestellt. Die Diskussion der Bilanzen der Momente zweiter Ordnung erfolgt in Kapitel 5. In Kapitel 6 werden häufig verwendete Modelle für Druck-Kovarianzen mit LES-Daten verglichen und Schlussfolgerungen für die Modellierung dieser Terme gezogen. Die Arbeit schließt mit Zusammenfassung und Ausblick in Kapitel 7.

2 Large-Eddy Simulation mit PALM

In dieser Arbeit wird das parallelisierte LES-Modell PALM in der Version 3.8 verwendet, welches seit Anfang der 1990er Jahre am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover entwickelt wird (RAASCH und ETLING, 1991, 1998; RAASCH und SCHRÖTER, 2001; LETZEL *et al.*, 2008; RIECHELMANN *et al.*, 2012). PALM ist in der Programmiersprache FORTRAN95 geschrieben und für die Untersuchung der atmosphärischen Grenzschicht geeignet, wie u.a. die soeben angeführten Literaturzitate belegen.

Im Folgenden werden in Kapitel 2.1 turbulente Strömungen behandelt, um die Grundprinzipien von LES zu erläutern. Die nachfolgenden Abschnitte geben eine Einführung in das LES-Modell PALM, wobei der Fokus auf der Beschreibung der für diese Studie relevanten Programmteile liegt. Zunächst wird das Grundgleichungssystem hergeleitet (Kap. 2.2), dann auf die Modellierung subskaliger Prozesse eingegangen (Kap. 2.3) und numerische Lösungsverfahren vorgestellt (Kap. 2.4). Schließlich werden Rand- und Anfangsbedingungen behandelt (Kap. 2.5) und die Parallelisierung des Modells (Kap. 2.6) aufgegriffen.

Für eine umfassende Beschreibung der Anwendungsgebiete von PALM sei auf die Online-Dokumentation (<http://palm.muk.uni-hannover.de>) verwiesen.

2.1 Turbulente Strömungen

Turbulente Strömungen zeichnen sich durch dreidimensionale, instationäre, nicht-periodische, dissipative Bewegungen aus, bei denen sich Wirbel unterschiedlicher Größe überlagern (GARRAT, 1992, S. 15). Mit der dimensionslosen Reynolds-Zahl $Re = \mathcal{U}\mathcal{L}/\nu$ lassen sich turbulente von laminaren Strömungen unterscheiden. Dabei geben \mathcal{U} und \mathcal{L} charakteristische Geschwindigkeits- und Längenskalen der großen Wirbel an und ν ist die kinematische Viskosität einer Strömung. Es handelt sich um eine laminare Strömung, wenn die Reynolds-Zahl einen bestimmten kritischen Wert, der von der Strömungsgeometrie abhängt, unterschreitet (z.B. POPE, 2000, S. 5f). Werden typische Skalen für die atmosphärische Grenzschicht eingesetzt, ergeben sich Reynolds-Zahlen in der Größenordnung von 10^7 bis 10^9 (ZORIC und SANDBORN, 1972), die den kritischen Wert überschreiten. Daher kann die Strömung in der Grenzschicht als turbulent bezeichnet werden.

Mit Hilfe der von KOLMOGOROV (1941) aufgestellten Hypothese zur lokalen Isotropie lassen sich im Spektrum der TKE drei ausgeprägte Bereiche identifizieren. Dabei besagt die Hypothese, dass die klein-skaligen turbulenten Bewegungen bei genügend hohen Reynolds-Zahlen statistisch isotrop sind (POPE, 2000, S. 184). Statistische Isotropie wiederum liegt dann vor, wenn alle statistischen Größen verschwindende Gradienten besitzen, keine Geschwindigkeitskomponente bevorzugt wird und die mittlere Geschwindigkeit Null ist (FRÖHLICH, 2006, S. 20). Im Bereich kleiner Wellenzahlen (großer Wellenlängen) weist das Spektrum ein Maximum auf. Dort wird Energie durch Scherung und Auftrieb produziert. Daran schließt sich der sog. Inertialbereich an, in dem die Energie von den großen zu den kleinen Skalen transferiert wird, indem die Wirbel in immer kleinere Wirbel zerfallen. Dort hängt das Spektrum nur von der Dissipationsrate ϵ und der Wellenzahl \tilde{k} ab und ist proportional zu $\epsilon^{2/3}\tilde{k}^{-5/3}$. Dieser Zerfall wird auch als Energiekaskade bezeichnet. Der

dritte Bereich wird Dissipationsbereich genannt und befindet sich im Bereich der kleinen Skalen. Dort wird TKE dissipiert, also durch viskose Effekte in Wärme umgewandelt (z.B. SAGAUT, 2001, S. 291f; POPE, 2000, S. 182ff). Aus dem Spektrum der TKE lässt sich ableiten, dass die großen Wirbel die energietragenden Wirbel sind.

Im Dissipationsbereich des Spektrums kann die sog. Kolmogorov-Länge $\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ definiert werden, die eine typische Längenskala der kleinsten im Spektrum vorkommenden Wirbel ist (FRÖHLICH, 2006, S. 24). In der Grenzschicht nahe des Erdbodens gilt $\eta \approx 1$ mm (KRAUS, 2008, S. 46). Das Verhältnis von den größten zu den kleinsten Turbulenzelementen kann mit $\mathcal{L}/\eta \sim \text{Re}^{3/4}$ abgeschätzt werden (z.B. POPE, 2000, S. 186).

Die numerische Behandlung turbulenter Strömungen lässt sich prinzipiell in drei verschiedene Ansätze unterteilen: Direkte Numerische Simulation (DNS), Large-Eddy Simulation (LES) und Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS) (z.B. FRÖHLICH, 2006, S. 3f). Dabei ist diese Einteilung mit der unterschiedlichen Behandlung des zuvor diskutierten Turbulenzspektrums verbunden. Die Grundlage für die numerische Berechnung turbulenter Strömungen stellen die Navier-Stokes-Gleichungen dar, die im folgenden Abschnitt 2.2 erläutert werden. Durch Diskretisierung der Gleichungen und Vorgabe von Rand- und Anfangsbedingungen, können numerisch approximiert Lösungen der Gleichungen berechnet werden.

Bei der DNS werden die dreidimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen direkt gelöst, indem alle im Turbulenzspektrum vorkommenden Skalen von Wirbeln bis hin zur Kolmogorov-Länge berechnet werden. Folglich benötigt die DNS kein Turbulenzmodell und stellt damit die genaueste Methode zur Simulation von Turbulenz dar. Lediglich Fehler durch numerische Verfahren können die Resultate beeinflussen (z.B. BREUER, 2002, S. 12). Damit aber alle Wirbel des Spektrums aufgelöst werden, muss die Zahl der Gitterpunkte pro Raumrichtung N_i bei isotroper Turbulenz proportional zu \mathcal{L}/η sein. Aufgrund der Dreidimensionalität von Turbulenz ergibt sich als Abschätzung für die Gesamtzahl N benötigter Gitterpunkte $N \approx N_i^3 \approx \text{Re}^{9/4}$ (FRÖHLICH, 2006, S. 46). Wird nun eine für die atmosphärische Grenzschicht typische Reynolds Zahl von 10^8 angenommen, folgt $N \approx 10^{18}$. Dies übersteigt allerdings die Kapazitäten heutiger Supercomputer, sodass die DNS für Simulationen atmosphärischer Turbulenz noch nicht geeignet ist.

In RANS-Simulationen werden die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen gelöst, welches eine komplette Parametrisierung des Turbulenzspektrums erfordert. Turbulenz geht im Mittel in die Gleichungen ein und muss über Turbulenzmodelle statistisch berücksichtigt werden (z.B. FRÖHLICH, 2006, S. 4). Das sich daraus ergebende Schließungsproblem und seine Behandlung werden in Kap. 1.1 im Rahmen der Berücksichtigung von Turbulenz in Wettermodellen, die auch zu den RANS-Modellen zählen, diskutiert. Die aufgestellten Turbulenzmodelle sind generell nicht allgemein gültig, weil sie nicht alle Skalen des Turbulenzspektrums gleichzeitig zufriedenstellend wiedergeben können (BREUER, 2002, S. 8). Allerdings führt die RANS-Simulationstechnik zu erheblich niedrigeren Simulationskosten im Vergleich zur DNS, weil die kleinsten Skalen nicht aufgelöst werden müssen.

Die LES, als dritter Ansatz, stellt einen Mittelweg zwischen DNS und RANS dar, indem die Navier-Stokes-Gleichungen räumlich gefiltert werden und damit die großen, energietragenden Wirbel des Spektrums aufgelöst und die kleinen Wirbel parametrisiert werden (z.B. MASON, 1994). Die Filterung erfolgt im Inertialbereich, wodurch eine Aufspaltung des Spektrums in Grobstruktur und Feinstruktur, auch Subgridskala genannt, bewirkt wird (FRÖHLICH, 2006, S. 107). Aufgrund des Filterns können bei LES im Vergleich zu DNS auch Strömungen mit hohen Reynoldszahlen turbulenzauflösend simuliert werden.

Dennoch stellt die LES, wie auch die DNS, hohe Anforderungen an den Speicherbedarf und die Rechenleistung heutiger Supercomputer. Im Gegensatz zu RANS-Schließungen, die das komplette Turbulenzspektrum abdecken müssen, können für die Subgridskala vielseitige Schließungsansätze verwendet werden, weil die kleinen Skalen basierend auf den Hypothesen von KOLMOGOROV (1941) universelle Eigenschaften aufweisen.

Mit der LES ist es also möglich, die turbulente Strömung der atmosphärischen Grenzschicht aufzulösen und statistische Momente höherer Ordnung zu bestimmen. Daher kommt sie im Rahmen dieser Arbeit durch Verwendung des LES-Modells PALM, welches in den nachfolgenden Abschnitten beschrieben wird, zum Einsatz.

2.2 Gleichungssystem

PALM basiert auf den Erhaltungsgleichungen für Impuls, Masse und innere Energie (potentielle Temperatur) sowie für aktive und passive Skalare, wobei diese Gleichungen auch als Navier-Stokes-Gleichungen bekannt sind. In dieser Arbeit steht die Feuchtkonvektion im Vordergrund, weshalb auch Effekte von Phasenübergängen in den Gleichungen berücksichtigt werden müssen. Die Erhaltungsgleichung für den Impuls (pro Masseneinheit) lautet in einem rotierenden, kartesischen Koordinatensystem in Tensornotation

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - g \delta_{i3} - \epsilon_{ijk} f_j u_k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu_m \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right). \quad (2.1)$$

u_j ist eine der drei Geschwindigkeitskomponenten u , v oder w , wobei $j \in \{1, 2, 3\}$. ∂ steht für den partiellen Differentialoperator, t bezeichnet die Zeit und x_j die kartesischen Koordinaten x , y , z . $f_i = (0, 2\Omega \cos(\varphi), 2\Omega \sin(\varphi))$ ist der Coriolisparameter mit der Winkelgeschwindigkeit Ω der Erde und der geographischen Breite φ . $g = 9.81 \text{ ms}^{-1}$ ist die Schwerebeschleunigung, die in vertikaler Richtung wirkt. \tilde{p} beschreibt den Druck und ν_m den molekularen Diffusionskoeffizienten für Impuls. Hier findet die Einsteinsche Summenkonvention Verwendung, die besagt, dass über doppelt auftretende Indizes in Produkten summiert wird. ϵ_{ijk} definiert den alternierenden Einheitstensor (Levi-Civita-Tensor) und δ_{ij} das Kronecker-Symbol. Die Terme in (2.1) beschreiben von links nach rechts die zeitliche Änderung der Geschwindigkeit durch Advektion, Auftrieb, Corioliseffekt, Druckgradientkraft und molekulare Reibung.

Die Erhaltungsgleichung für die Masse (pro Volumeneinheit), die auch Kontinuitätsgleichung genannt wird, lautet unter Verwendung der Dichte ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j). \quad (2.2)$$

Gl. 2.2 besagt, dass sich eine zeitliche Änderung der Dichte durch eine Divergenz des Massenflusses ergibt.

Als Erhaltungsgleichung für einen beliebigen Skalar s ergibt sich

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -u_j \frac{\partial s}{\partial x_j} + \nu_s \frac{\partial^2 s}{\partial x_j^2} + Q_s. \quad (2.3)$$

ν_s ist der molekulare Diffusionskoeffizient des Skalars und Q_s stellt Quell- bzw. Senkrate des Skalars dar. Aus (2.3) wird deutlich, dass sich ein Skalar auf Grund der Einflüsse von Advektion, molekularem Transport und Quellen/Senken zeitlich ändern kann. Wird für

das Skalar s die potentielle Temperatur θ eingesetzt, ergibt sich der erste Hauptsatz der Thermodynamik. Dabei ist θ wie folgt definiert:

$$\theta = T \left(\frac{p_{\text{ref}}}{\tilde{p}} \right)^{\frac{R_L}{c_p}}, \quad (2.4)$$

wobei T die aktuelle Temperatur und $p_{\text{ref}} = 1\,000$ hPa der Referenzdruck ist. Die spezifische Gaskonstante für trockene Luft lautet $R_L = 278 \text{ JK}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ und die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck ist $c_p = 1005 \text{ JK}^{-1} \text{ kg}^{-1}$. Des Weiteren sind Druck, Dichte und Temperatur über die diagnostische Zustandsgleichung idealer Gase miteinander verknüpft:

$$\tilde{p} = \rho R_L T. \quad (2.5)$$

Die soeben eingeführten Navier-Stokes-Gleichungen (2.1-2.3) beschreiben alle Phänomene der trockenen Atmosphäre. Um den Lösungsraum auf die zu untersuchenden Situationen einzuschränken, werden die Gleichungen vereinfacht. In PALM kommt dabei die sog. *Boussinesq-Approximation* zum Einsatz, die z.B. in ETLING (2002, Kap. 12.7) ausführlich beschrieben wird und für die Untersuchung flacher Konvektion ($z \lesssim 3000$ m) geeignet ist (DUTTON und FICHTL, 1969). Dazu werden die thermodynamischen Variablen Druck \tilde{p} , Dichte ρ und Temperatur T , die in der folgenden Gleichung mit der Variablen ψ zusammengefasst werden ($\psi \in \{\tilde{p}, T, \rho\}$), in einen nur von der Höhe abhängigen Grundzustand ψ_0 und eine Abweichung ψ^* davon zerlegt: $\psi(x, y, z, t) = \psi_0(z) + \psi^*(x, y, z, t)$. Als weitere Annahme soll gelten, dass $\psi^*/\psi_0 \ll 1$, also die Abweichungen im Vergleich zum Grundzustand klein sind. Für den Grundzustand gilt die statische Grundgleichung $\partial p_0 / \partial z = -g\rho_0$ und die Gasgleichung 2.5. Beim Druck wird die Abweichung p^* in zwei Anteile (p_L und p) zerlegt, sodass sich

$$\tilde{p}(x, y, z, t) = p_0(z) + p_L(x, y) + p(x, y, z, t) \quad (2.6)$$

ergibt. Dabei bezeichnet p_L die synoptisch-skalige Druckabweichung, die mit der geostrophischen Windbeziehung

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_L}{\partial x_i} = \epsilon_{i3k} f_3 u_{g_k}, \quad (2.7)$$

ausgedrückt werden kann. $u_{g_k} = (u_g, v_g, 0)$ gibt den geostrophischen Wind an, der sich unter der Annahme, dass Druckgradient- und Corioliskraft im Gleichgewicht stehen, einstellt. p ist dann die verbleibende mesoskalige Druckabweichung.

Nach Einsetzen aller zuvor beschriebenen Annahmen in die Kontinuitätsgleichung folgt

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.8)$$

also die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes, sowie für die Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\theta_v^*}{\theta_{v0}} g \delta_{i3} - \epsilon_{ijk} f_j u_k - \epsilon_{i3k} f_3 u_{g_k} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu_m \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right). \quad (2.9)$$

Um zu (2.9) zu gelangen, werden die Dichteabweichungen außer im Auftriebsterm vernachlässigt und die im Auftriebsterm verbleibende Dichteabweichung mittels der Zustandsgleichung über die Abweichung der virtuellen potentiellen Temperatur θ_v^* ausgedrückt. Die Divergenzfreiheit der Strömung ermöglicht es, den Advektionsterm in Flussform zu schreiben. Außerdem können dadurch keine Schallwellen auftreten, welches einen größeren Zeitschritt

bei der numerischen Integration der Gleichungen ermöglicht. Zusammengefasst wird also durch die Boussinesq-Approximation die Strömung als inkompressibel betrachtet, wobei Dichteunterschiede für die Archimedische Auftriebskraft berücksichtigt werden.

Die einem LES-Modell zugrunde liegende Skalentrennung in Grob- und Feinstruktur wird durch Filterung der Navier-Stokes-Gleichungen bewirkt. Dieser räumliche Filteransatz basiert auf LEONARD (1974) und besagt, dass sich eine beliebige Variable $\psi(x_i, t)$ in einen gefilterten Anteil $\bar{\psi}$ und einen subskaligen (SGS) Anteil ψ' gemäß $\psi = \bar{\psi} + \psi'$ zerlegen lässt. Die Skalentrennung entspricht einer Tief-Pass-Filterung im Phasenraum und lässt sich im Ortsraum allgemein mit Hilfe eines Faltungsintegrals beschreiben:

$$\bar{\psi}(x_i, t) = \int_{\tilde{D}} dx'_i G(x_i - x'_i, \tilde{\Delta}) \psi(x'_i, t), \quad (2.10)$$

wobei über das gesamte Strömungsgebiet \tilde{D} integriert wird. G ist die Filterfunktion und besitzt eine charakteristische Filterlänge $\tilde{\Delta}$. Der SGS-Anteil $\psi' = \psi - \bar{\psi}$ enthält alle Wirbel, deren Abmessungen kleiner als $\tilde{\Delta}$ sind und wird somit nicht aufgelöst. Üblicherweise wird gefordert, dass die Filterfunktion G linear ist, Konstanten erhält und kommutativ bezüglich der Ableitungsbildung ist. Dadurch stellt sie im Allgemeinen keinen Reynolds-Operator¹ dar (z.B. SAGAUT, 2001, S. 10f).

Neben dem soeben erläuterten Filteransatz, der auf der expliziten Benutzung eines analytischen Filters beruht, hat sich als weiterer Filteransatz für LES der sog. Deardorff-Schumann-Ansatz etabliert, der auf Arbeiten von DEARDORFF (1970a) und SCHUMANN (1973, 1975) basiert (BREUER, 2002, S. 69ff). Dieser Ansatz, der auch in PALM zur Anwendung kommt, verwendet eine implizite Filterung, bei der die Filterweite $\bar{\Delta}$ gleich der charakteristischen Gitterweite Δ gesetzt wird. Damit wird über die Diskretisierung eine Unterscheidung zwischen Grob- und Feinstruktur herbeigeführt. Die Filterung nach SCHUMANN (1975) lässt sich daher als Mittelung über diskrete, nicht überlappende Gittervolumina $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ darstellen:

$$\bar{\psi} = \frac{1}{V} \int_{\Delta x} \int_{\Delta y} \int_{\Delta z} dx' dy' dz' \psi(x', y', z', t), \quad (2.11)$$

wobei Δx , Δy , Δz die Gitterweiten des numerischen Gitters in x-, y-, z-Richtung bezeichnen. Die Filterung durch die Diskretisierung verhält sich wie ein Reynolds-Operator (SCHUMANN, 1973). Daher lassen sich die gefilterten Impulsflüsse $\overline{u_i u_k}$ der Boussinesq-approximierten Bewegungsgleichungen 2.9 über

$$\overline{u_i u_j} = \overline{(\bar{u}_i + u'_i) (\bar{u}_j + u'_j)} = \bar{u}_i \bar{u}_j + \overline{u'_i u'_j} \quad (2.12)$$

ausdrücken. Dies stellt eine Vereinfachung in der Behandlung der SGS-Flüsse gegenüber der expliziten Filtermethode dar, bei der noch der sog. Leonard-Term und der Kreuzspannungsterm auftauchen, die Wechselwirkungen zwischen Wirbelelementen der Grob- und Feinstruktur beinhalten. Allerdings ergibt sich als Nachteil gegenüber der expliziten Filterung, dass Filterung und Diskretisierung gekoppelt sind und somit die zwei Prozesse nicht isoliert betrachtet werden können (z.B. BREUER, 2002, S. 69f; FRÖHLICH, 2006, S. 127f).

Die Berücksichtigung von thermodynamischen und wolkenphysikalischen Prozessen erfolgt in PALM zum einen über die Prognose der gefilterten potentiellen Flüssigwassertemperatur

$$\bar{\theta}_1 = \bar{\theta} - \frac{L_v}{c_p \Gamma} \bar{q}_1, \quad (2.13)$$

¹Eigenschaften von Reynolds-Operatoren werden in Kap. 3.1 beschrieben

die in einer linearisierten Form nach BETTS (1973) verwendet wird, und zum anderen über die Prognose des gefilterten Gesamtwassergehalts

$$\bar{q} = \bar{q}_v + \bar{q}_l. \quad (2.14)$$

\bar{q}_v ist die gefilterte spezifische Feuchte und \bar{q}_l die gefilterte spezifische Feuchte von Flüssigwasser, die auch Flüssigwassergehalt genannt wird. $L_v = 2.5 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$ stellt die Verdunstungswärme und $\Gamma = (\tilde{p}/p_{\text{ref}})^{R_L/c_p}$ die Exner-Funktion (siehe auch Gl. 2.4) dar. Die Verwendung von $\bar{\theta}_l$ und \bar{q} als prognostische Größen ist vorteilhaft bei der Simulation von Feuchtkonvektion mit Wolken, weil $\bar{\theta}_l$ und \bar{q} in Abwesenheit von Strahlungs- oder Niederschlagsprozessen Erhaltungsgrößen sind. Außerdem müssen Phasenübergänge in den Gleichungen nicht explizit behandelt werden. Wenn Verdunstung und Kondensation nicht berücksichtigt werden, reduzieren sich die Gleichungen automatisch zu den Gleichungen einer trockenen Grenzschicht. Diese und weitere Vorteile für die Verwendung von $\bar{\theta}_l$ und \bar{q} als prognostische Größen werden in DEARDORFF (1976) diskutiert.

Für die gefilterte virtuelle potentielle Temperatur $\bar{\theta}_v$ gilt

$$\begin{aligned} \bar{\theta}_v &= \bar{\theta} \left(1 + \left[\frac{R_v}{R_L} - 1 \right] \bar{q}_v - \bar{q}_l \right) \\ &= \bar{\theta} (1 + 0.61 \bar{q}_v - \bar{q}_l). \end{aligned} \quad (2.15)$$

$R_v = 461 \text{ JK}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ ist die Gaskonstante für Wasserdampf. Wird im Auftriebsterm der Bewegungsgleichungen $\bar{\theta}_v$ verwendet, so werden Dichteunterschiede auf Grund von Wasserdampf und Flüssigwasser berücksichtigt.

Kondensationsprozesse werden in PALM mittels des in CUIJPERS und DUYNKERKE (1993) beschriebenen auf SOMMERIA und DEARDORFF (1977) basierenden Kondensationschemas behandelt. Diese Schema lässt nur vollständig gesättigte oder vollständig ungesättigte Gittervolumina zu. Der aufgelöste Flüssigwasseranteil \bar{q}_l ergibt sich diagnostisch mit Hilfe des Sättigungswerts \bar{q}_s der spezifischen Feuchte:

$$\bar{q}_l = \begin{cases} \bar{q} - \bar{q}_s & \text{falls } \bar{q} > \bar{q}_s \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.16)$$

Dabei lässt sich der Sättigungswert \bar{q}_s aus einer abgebrochenen Taylor-Reihenentwicklung von $q_s(T)$ und der Clausius-Clapeyron Gleichung bestimmen. Eine weiterführende Herleitung ist SCHRÖTER (2003, Kap. 2.2.4) zu entnehmen. Die spezifische Feuchte \bar{q}_v , die in die virtuelle potentielle Temperatur einfließt, folgt durch Umstellen von (2.14).

Strahlungs- und Niederschlagsprozesse fließen in die Quellterme \bar{Q}_θ und \bar{Q}_q der skalaren Erhaltungsgleichungen 2.20 und 2.21 ein und werden in PALM standardmäßig mit sehr einfachen Approximationen behandelt. Auf die Beschreibung der Parametrisierungen wird an dieser Stelle verzichtet, weil sie in der vorliegenden Arbeit nicht verwendet werden. Eine detaillierte Beschreibung ist SCHRÖTER (2003, Kap. 2.2.4) zu entnehmen. Eine kompakte Darstellung der in PALM verwendeten Wolkenphysik und neue Ansätze zur expliziten Simulation von wolkenphysikalischen Prozessen mittels eines Lagrangeschen Partikelmodells finden sich bei RIECHELMANN *et al.* (2012). Die in die simulierten Szenarien einfließenden Quellterm \bar{Q}_θ und \bar{Q}_q werden bei der Beschreibung der Setups in Kap. 4 erläutert.

In den Simulationen der bewölkten Grenzschichten (siehe auch Abschnitte 4.2 und 4.3) wird großräumiges Absinken als zusätzlicher Antrieb vorgegeben. Die Setups der Simulationen beruhen auf LES-Modellvergleichen (SIEBESMA *et al.*, 2003; STEVENS *et al.*, 2005),

die das Absinken in Form von Quelltermen in den prognostischen Gleichungen von \bar{u} , \bar{v} , $\bar{\theta}_1$ und \bar{q} vorgeben. Diese Quellterme lauten

$$\bar{Q}_{\psi, \text{SU}} = -w_s \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_3}, \quad (2.17)$$

wobei $\bar{\psi} = \{\bar{u}, \bar{v}, \bar{\theta}_1, \bar{q}\}$. Die großräumige Absinkgeschwindigkeit w_s wird als horizontal homogenes und zeitlich invariantes Profil vorgegeben, sodass $w_s = w_s(z)$. Aufgrund der Inkompressibilität und der verwendeten zyklischen Randbedingungen (siehe Abschnitt 2.5), verschwindet das horizontale Mittel von \bar{w} über das Modellgebiet. Dies bleibt auch bei Verwendung von großräumigem Absinken erhalten, weil das Absinken nicht auf \bar{w} angewendet wird.

Nach Filterung der Boussinesq-approximierten Navier-Stokes-Gleichungen, Vernachlässigung der molekularen Diffusion, die einige Größenordnungen kleiner als die turbulente Diffusion ist (ETLING, 2002, S. 261) sowie Berücksichtigung des großräumigen Absinkens, folgen die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = & -\frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} + g \frac{\bar{\theta}'_v}{\theta_{v0}} \delta_{i3} - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k - \varepsilon_{i3k} f_3 u_{gk} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \\ & - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \delta_{i1} w_s \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3} - \delta_{i2} w_s \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x_3}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.19)$$

und die Erhaltungsgleichungen für $\bar{\theta}_1$ und \bar{q}

$$\frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_j \bar{\theta}_1)}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{\theta j}}{\partial x_j} - w_s \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_3} + \bar{Q}_\theta, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_j \bar{q})}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{qj}}{\partial x_j} - w_s \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_3} + \bar{Q}_q, \quad (2.21)$$

die das Grundgleichungssystem von PALM darstellen. Die Abweichung der gefilterten virtuellen potentiellen Temperatur vom Grundzustand $\bar{\theta}_v^*$ wird als Abweichung vom horizontalen Mittel bestimmt: $\bar{\theta}_v^* = \bar{\theta}'_v = \bar{\theta}_v - \langle \bar{\theta}_v \rangle$.² Der Grundzustand der Dichte wird als höhenunabhängig angenommen und $\rho_0 = 1 \text{ kg m}^{-3}$ gesetzt. Um das Gleichungssystem von PALM zu schließen, werden für die SGS-Impulsflüsse $\tau_{ij} = \overline{u'_i u'_j}$ sowie die skalaren SGS-Flüsse $\tau_{\theta i} = \overline{u'_i \theta'_1}$ und $\tau_{qi} = \overline{u'_i q'}$ Ansätze benötigt, die im nachfolgenden Kapitel erläutert werden.

2.3 Subskalenmodell

Im Subskalenmodell werden Transportprozesse auf Skalen behandelt, die kleiner als die Filterlänge sind. Insbesondere muss das Subskalenmodell für die Dissipation von TKE sorgen. Damit kommt ihm eine zentrale Bedeutung im Rahmen der LES zu, welches sich in einer Vielzahl an möglichen Schließungsansätzen widerspiegelt (siehe z.B. die Übersichten von SAGAUT (2001, Kap. 6), BREUER (2002, Kap. 3.3) oder FRÖHLICH (2006, Kap. 6)).

²Die hier verwendete Notation wird in Abschnitt 3.1 erläutert.

In PALM wird ein Schließungsansatz 1.5-facher Ordnung basierend auf DEARDORFF (1980) verwendet, bei dem eine prognostische Gleichung für die subskalige (SGS) TKE

$$e = \frac{1}{2}\tau_{ii} = \frac{1}{2}\overline{u_i'^2} \quad (2.22)$$

gelöst wird und die übrigen Momente zweiter Ordnung, also die SGS-Flüsse, mittels Gradientensätzen formuliert werden. Die subskalige TKE-Gleichung, deren Herleitung und Terme genauer in Kap. 3.1 beschrieben werden, lautet

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{\partial(\overline{u_j}e)}{\partial x_j} - \tau_{ij}\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{g}{\theta_{v0}}\tau_{v3} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\overline{u_j'\left(e' + \frac{p'}{\rho_0}\right)}\right\} - \epsilon. \quad (2.23)$$

$\tau_{v3} = \overline{u_3'\theta_v'}$ ist der vertikale SGS-Fluss der virtuellen potentiellen Temperatur und ϵ die Disipationsrate der TKE. Der SGS-Impulsflusstensor τ_{ij} wird mit einem Deformationsansatz parametrisiert:

$$\tau_{ij} = -K_m\left(\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u_j}}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}e\delta_{ij}. \quad (2.24)$$

Für die SGS-Flüsse werden Gradientensätze verwendet, sodass

$$\tau_{\theta j} = -K_h\left(\frac{\partial\overline{\theta_l}}{\partial x_j}\right), \quad (2.25)$$

$$\tau_{qj} = -K_h\left(\frac{\partial\overline{q}}{\partial x_j}\right). \quad (2.26)$$

gilt. Die turbulenten Diffusionskoeffizienten K_m für Impuls und K_h für die Skalare werden über einen Mischungswegansatz einbezogen, bei dem die Mischungsweglänge l , die eine Maß für die Wirbelgröße darstellt, einfließt:

$$K_m = 0.1l\sqrt{e}, \quad (2.27)$$

$$K_h = \left(1 + 2\frac{l}{\Delta}\right)K_m. \quad (2.28)$$

$\Delta = \sqrt[3]{\overline{\Delta x \Delta y \Delta z}}$ ist die charakteristische Gitterweite. Die Mischungsweglänge l muss verschiedenen Anforderungen genügen. So muss sie zum einen wenigstens dieselbe Größe haben wie Δ , weil subskalige Prozesse beschrieben werden. Zum anderen kann sie nicht größer als der senkrechte Abstand d zur festen Oberfläche sein und bei stabiler Schichtung ist sie kleiner als bei stabiler Schichtung, sodass sich

$$l = \begin{cases} \min\left(\Delta, 0.7d, 0.76\sqrt{e}\left(\frac{g}{\theta_{v0}}\frac{\partial\overline{\theta_v}}{\partial z}\right)^{-\frac{1}{2}}\right) & \text{für } \frac{\partial\overline{\theta_v}}{\partial z} > 0 \\ \min(\Delta, 0.7d) & \text{für } \frac{\partial\overline{\theta_v}}{\partial z} \leq 0 \end{cases} \quad (2.29)$$

ergibt.

Der subskalige, turbulente Fluss der SGS-TKE, $\overline{u_j'e'}$, wird zusammen mit dem Fluss durch SGS-Druckfluktuationen $1/\rho_0\overline{u_j'p'}$ über den Gradienten der SGS-TKE parametrisiert:

$$\overline{u_j'\left(e' + \frac{p'}{\rho_0}\right)} = -2K_m\frac{\partial e}{\partial x_j}. \quad (2.30)$$

Für die Dissipationsrate gilt

$$\epsilon = \left(0.19 + 0.74 \frac{l}{\Delta} \right) \frac{e^{\frac{3}{2}}}{l}. \quad (2.31)$$

Somit verbleibt nur noch der SGS-Auftriebsfluss $\tau_{v3} = \overline{u'_3 \theta'_v}$ als zu schließende Größe in Gl. 2.23. Er wird auf die SGS-Flüsse 2.25 und 2.26 zurückgeführt, sodass

$$\tau_{v3} = K_1 \tau_{\theta 3} + K_2 \tau_{q3} \quad (2.32)$$

folgt. Die Koeffizienten K_1 und K_2 werden nach CUIJPERS und DUYNKERKE (1993) und DEARDORFF (1980) in Abhängigkeit vom Sättigungszustand des Gittervolumens ausgedrückt. In ungesättigter Luft ($\bar{q}_1 = 0$) gilt

$$K_1 = 1.0 + 0.61 \bar{q}, \quad (2.33)$$

$$K_2 = 0.61 \bar{\theta}. \quad (2.34)$$

In gesättigter Luft ($\bar{q}_1 \neq 0$) gilt

$$K_1 = \frac{1.0 - \bar{q} + 1.61 \bar{q}_s \left(1.0 + 0.622 \frac{L_v}{R_i T} \right)}{1.0 + 0.622 \frac{L_v}{R_i T} \frac{L_v}{c_p T} \bar{q}_s}, \quad (2.35)$$

$$K_2 = \bar{\theta} \left(\left(\frac{L_v}{c_p T} \right) K_1 - 1.0 \right). \quad (2.36)$$

Genau betrachtet wird über (2.24) der spurlose SGS-Impulsflusstensor $\tau_{ij} - \frac{2}{3} e \delta_{ij}$, der aus Umstellen von (2.24) folgt, mit einem Deformationsansatz beschrieben. Daher fließt nicht τ_{ij} , sondern der reduzierte SGS-Tensor

$$\tau_{ij}^r = \tau_{ij} - \frac{2}{3} e \delta_{ij} \quad (2.37)$$

in die Bewegungsgleichungen 2.18 ein. Die Spur des sich dadurch zusätzlich ergebenden Tensors $2/3 e \delta_{ij}$ wird zum dynamischen Druck \bar{p} hinzu addiert, sodass der modifizierte Druck

$$\bar{\pi} = \bar{p} + \frac{2}{3} e \quad (2.38)$$

in die Bewegungsgleichungen einfließt, die somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = & - \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} + g \frac{\bar{\theta}''}{\theta_0} \delta_{i3} - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k - \varepsilon_{ij3} f_3 u_{g_j} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{\pi}}{\partial x_i} \\ & - \frac{\partial \tau_{ij}^r}{\partial x_j} - \delta_{i1} w_s \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3} - \delta_{i2} w_s \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x_3} \end{aligned} \quad (2.39)$$

lauten. Damit ist das Gleichungssystem von PALM geschlossen und das Augenmerk wird nun auf die numerische Behandlung der Gleichungen gelegt.

2.4 Diskretisierung und numerische Lösungsverfahren

Die PALM zugrunde liegenden Navier-Stokes-Gleichungen bestehen aus partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung, deren analytische Lösung nur in wenigen Spezialfällen möglich ist. Daher wird auf numerische Lösungsmethoden zurückgegriffen. Dies erfordert eine Diskretisierung in Zeit und Raum, sodass die Zustandsgrößen nur zu diskreten Zeit- und an diskreten Raumpunkten definiert sind. Im Folgenden werden daher die in PALM verwendeten Diskretisierungen und die sich daraus ergebenden, in dieser Arbeit verwendeten Lösungsverfahren vorgestellt.

2.4.1 Zeitliche Diskretisierung

Bei der zeitlichen Diskretisierung wird die Zeit t in diskrete Zeitpunkte t^n zerlegt ($n \in \mathbb{N}$). Der Zeitschritt Δt wird dabei als die Differenz von einem zum anderen Zeitpunkt definiert: $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Die zeitliche Integration der Navier-Stokes-Gleichungen erfolgt mit Hilfe eines Runge-Kutta Verfahrens. Eine gewöhnliche Differentialgleichung für eine gefilterte Variable $\bar{\psi}$ lautet

$$\frac{d}{dt}\bar{\psi}(t, x_i) = f(t, \bar{\psi}) \quad (2.40)$$

und kann mit einem expliziten N -stufigen Runge-Kutta Verfahren zwischen t^n und $t^n + \Delta t$ integriert werden. Die Ortsabhängigkeit von $\bar{\psi}$ wird aus Gründen der Übersichtlichkeit im Folgenden nicht explizit notiert. Ein Runge-Kutta Verfahren N -ter Ordnung lautet (z.B. BALDAUF, 2008):

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(t^{(0)}) &= \bar{\psi}(t^n) \\ k^{(i)} &= f(t^n + \alpha_i \Delta t, \bar{\psi}(t^{(i-1)})) \\ \bar{\psi}(t^{(i)}) &= \bar{\psi}(t^n) + \Delta t \cdot \sum_{j=1}^i \beta_{i+1,j} k^{(j)} \\ \bar{\psi}(t^n + \Delta t) &= \bar{\psi}(t^{(N)}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

mit $i = 1, 2, \dots, N$.

In dieser Arbeit wird das in PALM implementierte Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung ($N = 3$) benutzt. Die benötigten Koeffizienten besitzen die folgenden Werte: $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1/3$, $\alpha_3 = 3/4$, $\beta_{2,1} = 1/3$, $\beta_{3,1} = -3/16$, $\beta_{3,2} = 15/16$, $\beta_{4,1} = 1/6$, $\beta_{4,2} = 3/10$, $\beta_{4,3} = 8/15$. Werden diese Werte in das Verfahren 2.41 eingesetzt, folgt

$$\begin{aligned} k^{(1)} &= f(t^n, \bar{\psi}(t^{(0)})) \\ k^{(2)} &= f\left(t^n + \frac{1}{3}\Delta t, \bar{\psi}(t^{(1)})\right) \\ k^{(3)} &= f\left(t^n + \frac{3}{4}\Delta t, \bar{\psi}(t^{(2)})\right) \\ \bar{\psi}(t^n + \Delta t) &= \bar{\psi}(t^{(3)}) = \bar{\psi}(t^n) + \Delta t \left(\frac{1}{6}k^{(1)} + \frac{3}{10}k^{(2)} + \frac{8}{15}k^{(3)} \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Im Runge-Kutta Verfahren werden also die Tendenzen $f(t, \bar{\psi})$ zu drei Teilzeitschritten innerhalb des Zeitschrittes Δt bestimmt und dann gewichtet gemittelt, um die Prognose zum nächsten Zeitschritt $t^n + \Delta t$ zu erhalten. Dabei gehen also die Tendenzen zu t^n , $t^n + 1/3\Delta t$ und $t^n + 3/4\Delta t$ ein. Daher müssen die prognostischen Größen pro Zeitschritt Δt drei Mal gelöst werden.

Damit die numerische Stabilität der Prognose sichergestellt ist, muss der Zeitschritt Δt zum einen das Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Kriterium (COURANT *et al.*, 1928)

$$\Delta t_{\text{CFL}} \leq \min \left(\frac{\Delta x_i}{\bar{u}_{i_{\max}}} \right) \quad (2.43)$$

und zum anderen das Diffusionskriterium (ROACHE, 1985)

$$\Delta t_{\text{Diff}} \leq \min \left(\frac{0.125 \cdot \min((\Delta x)^2, (\Delta y)^2, (\Delta z)^2)}{\max(K_m, K_h)} \right) \quad (2.44)$$

erfüllen, woraus für den Zeitschritt

$$\Delta t \leq f_{dt} \min(\Delta t_{CFL}, \Delta t_{Diff}) \quad (2.45)$$

folgt. f_{dt} ist ein Sicherheitsfaktor, der vom verwendeten Zeitschrittverfahren abhängt und beim Runge-Kutta Verfahren den Wert $f_{dt} = 0.9$ besitzt. Damit wird der Zeitschritt bei der Prognose von t^n zu t^{n+1} mittels des Zeitschrittkriteriums (2.45) angepasst und besitzt betrachtet über die gesamte Simulation keinen konstanten Wert.

In Simulationen von Kumulus bedeckten Grenzschichten (siehe Abschnitt 4.2) wird eine Galilei-Transformation verwendet, bei der das Koordinatensystem mit dem geostrophischen Wind mitbewegt wird. Dies erlaubt einen höheren Zeitschritt, weil die relative Geschwindigkeit durch die Transformation kleiner als die absolute ist.

2.4.2 Räumliche Diskretisierung

Bei der räumlichen Diskretisierung werden die kontinuierlichen Variablen durch diskrete Werte ersetzt und auf einem dreidimensionalen Gitter definiert. In PALM wird ein rechtwinkliges, versetztes (Arakawa-C-) Gitter (ARAKAWA und LAMB, 1977) verwendet. Die skalaren Größen sind im Zentrum des durch Δx , Δy und Δz aufgespannten Gittervolumens definiert. Die vektoriellen Größen werden versetzt dazu angeordnet. Die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten \bar{u} und \bar{v} befinden sich um eine halbe Gitterweite in negative x- bzw. y-Richtung verschoben. Die vertikale Komponente \bar{w} ist um eine halbe Gitterweite in positive z-Richtung versetzt. Diese Anordnung hat zur Folge, dass sich die effektive Auflösung der Variablen verdoppelt, weil die Zentrierung von Ableitungen der Geschwindigkeitskomponenten auf den Gittermittelpunkt ohne zusätzliche Interpolation auskommt (PIELKE, 2002, S.362f). In dieser Arbeit wird mit äquidistanten Gitterweiten simuliert.

Zur räumlichen Diskretisierung der Ableitungen wird das Verfahren der finiten Differenzen eingesetzt, bei dem Differentialoperatoren mit finiten Differenzen approximiert werden ($\partial x \rightarrow \Delta x$). Dabei werden die partiellen räumlichen Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzt, die sich aus Linearkombinationen abgebrochener Taylorreihenentwicklungen der Variablen um einen Gitterpunkt ergeben (z.B. FERZIGER und PERIĆ, 1996, Kap. 3). Als Diskretisierungsfehler werden die nicht berücksichtigten Terme der Taylorreihe bezeichnet, wobei die darin enthaltene niedrigste Potenz die Ordnung bzw. Genauigkeit der Näherung angibt. Verfahren ungerader Ordnung produzieren Fehler auf Grund von numerischer Dissipation, welche glättend wirkt und Verfahren gerader Ordnung führen zu Dispersionsfehlern, die sich z.B. durch Oszillationen in der Nähe von starken Gradienten äußern (DURRAN, 1999, S. 80ff).

Die Differenzenapproximation der nicht-linearen Advektionsterme erfolgt mit einem Advektionsverfahren fünfter Ordnung nach WICKER und SKAMAROCK (2002), welches im Folgenden mit WS abgekürzt wird. Ausgehend von einer eindimensionalen Advektionsgleichung einer gefilterten Variable in Flussform

$$\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}\bar{\psi}), \quad (2.46)$$

lässt sich der Advektionsterm mittels Flüssen $F_{i-1/2}$ am linken und $F_{i+1/2}$ am rechten Rand des Gittervolumens über

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}\bar{\psi}) \approx \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x} \quad (2.47)$$

approximieren. Dabei steht der Index i in diesem Abschnitt für den betrachteten Gitterpunkt in x-Richtung und nicht für die in Tensornotation gebräuchliche Raumrichtung.

Beim Verfahren fünfter Ordnung gehen sowohl Flüsse sechster Ordnung F^6 ein, die sich aus Linearkombination von abgebrochenen Taylorreihen sechster Ordnung von $\partial\bar{\psi}/\partial x$ ergeben als auch künstlich hinzugefügte Terme, die aus einer Diskretisierung von $\partial^6\bar{\psi}/\partial x^6$ folgen. Sie können auf einem Arakawa-C-Gitter wie folgt formuliert werden:

$$F_{i-1/2}^5 = F_{i-1/2}^6 - \frac{|\bar{u}_{i-1/2}|}{60} [10(\bar{\psi}_i - \bar{\psi}_{i-1}) - 5(\bar{\psi}_{i+1} - \bar{\psi}_{i-2}) + (\bar{\psi}_{i+2} - \bar{\psi}_{i-3})] \quad (2.48)$$

mit

$$F_{i-1/2}^6 = \frac{|\bar{u}_{i-1/2}|}{60} [37(\bar{\psi}_i + \bar{\psi}_{i-1}) - 8(\bar{\psi}_{i+1} + \bar{\psi}_{i-2}) + (\bar{\psi}_{i+2} + \bar{\psi}_{i-3})]. \quad (2.49)$$

$u_{i\pm 1/2}$ bezeichnen die um $\pm \frac{\Delta x}{2}$ versetzten Geschwindigkeitskomponenten relativ zu $\bar{\psi}_i$. Der Fluss fünfter Ordnung besteht aus dem Fluss sechster Ordnung und einem Dissipationsterm, der die Dispersionsfehler, die durch den Fluss sechster Ordnung entstehen, ausgleichen soll. Das WS-Verfahren beinhaltet also numerische Dissipation, weshalb es die Varianz der advehierten Größe nicht erhält. Weitergehende Informationen zu den Eigenschaften von WS und der Implementierung in PALM sind SÜHRING (2010) zu entnehmen.

Die Mehrheit der in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse basiert auf Simulationen mit dem WS-Verfahren. Dennoch kommen noch weitere in PALM implementierte Advektionsverfahren in den Sensitivitätsuntersuchungen (Kap. 4) zum Einsatz, auf die im Folgenden kurz eingegangen wird.

Zum einen wird das auf PIACSEK und WILLIAMS (1970) (C3) basierende zentrierte Advektionsschema zweiter Ordnung verwendet, welches die Varianz erhält und mit PW abgekürzt wird. Statt der Flussform wird die schief-symmetrische Form des Advektionsterms verwendet:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial(\bar{u}\bar{\psi})}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x} \right) = \frac{\bar{u}_{i+1/2}\bar{\psi}_{i+1} - \bar{u}_{i-1/2}\bar{\psi}_{i-1}}{2\Delta x}. \quad (2.50)$$

Zum anderen gibt es in PALM die Möglichkeit, die Skalaradvektion mit einem anderen Verfahren als die Impulsadvektion durchzuführen. Als Advektionsschema für Skalare ist ein auf CHLOND (1994) basierendes, monotones Verfahren implementiert. Da es auch auf den Arbeiten von BOTT (1989a,b) basiert, wird es im Folgenden mit BC (für Bott-Chlond) abgekürzt. Dieses Verfahren stellt sicher, dass die Skalare während des Transportprozesses positiv definit bleiben, weil es monoton ist, d.h. vorhandene Extrema nicht verstärkt oder neu produziert. Es zeichnet sich ferner durch sehr gute Erhaltungseigenschaften für Skalare aus, da es nur wenig numerische Dissipation besitzt. Dieses Verfahren ist allerdings relativ aufwendig und liegt nicht in einer optimierten Form vor, sodass seine Einsatzmöglichkeiten begrenzt sind. Außerdem erfolgt die Zeitintegration für die Skalare bei Verwendung des BC-Verfahrens nicht mit dem Runge-Kutta Verfahren sondern mit einem Euler-Verfahren, welches nur erster Ordnung ist.

2.4.3 Sicherstellen der Inkompressibilität

Eine wesentliche Annahme der Boussinesq-Approximation ist die Inkompressibilität der Strömung (siehe Gl. 2.19). Dadurch ist der Druck $\bar{\pi}$ nicht mit den anderen thermodynamischen Variablen über eine Zustandsgleichung gekoppelt und somit ein rein dynamischer Druck. Folglich kann der Druckgradient-Term in den Bewegungsgleichungen 2.39 als eine Art Quellterm bezeichnet werden, der so bestimmt wird, dass das Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei wird (siehe z.B. FRÖHLICH, 2006, Kap. 4.4.1). In PALM wird

dazu eine Prädiktor-Korrektor Methode verwendet, die auf CHORIN (1968, 1969) und PATRINOS und KISTLER (1976) basiert. Bei dieser Methode spaltet sich die Integration des Geschwindigkeitsfeldes in zwei Schritte auf. Zunächst werden die gefilterten Boussinesq-approximierten Bewegungsgleichungen (2.39) zu jedem Zeitschritt ohne den Druckterm $-1/\rho_0 \partial \bar{\pi} / \partial x_i$ gelöst. Daraus folgt ein vorläufiges Geschwindigkeitsfeld $\bar{u}_{i,\text{vorl}}(t^n + \Delta t, x_i)$, welches in der Regel nicht divergenzfrei ist. Nach erfolgter numerischer Integration lässt sich das Geschwindigkeitsfeld $\bar{u}_i(t^n + \Delta t, x_i)$ folgendermaßen beschreiben:

$$\bar{u}_i(t^n + \Delta t, x_i) = \bar{u}_{i,\text{vorl}}(t^n + \Delta t, x_i) - \frac{r^{(l)} \Delta t}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\pi}(t^n, x_i). \quad (2.51)$$

Der Faktor $r^{(l)}$ hängt vom verwendeten Zeitschrittverfahren ab. Um nun die Prognose mittels (2.51) zu vervollständigen, muss noch der modifizierte Druck $\bar{\pi}$ bestimmt werden, welches den zweiten Schritt der Prädiktor-Korrektor Methode darstellt. Eine Bestimmungsgleichung für $\bar{\pi}$ ergibt sich daraus, den Divergenzoperator $\partial/\partial x_i$ auf (2.51) anzuwenden, die Forderung nach Divergenzfreiheit für das endgültige Geschwindigkeitsfeld $\bar{u}_i(t^n + \Delta t, x_i)$ zu erfüllen und nach $\bar{\pi}$ umzustellen, woraus

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \bar{\pi}(t^n, x_i) = \frac{1}{r^{(l)} \Delta t} \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{u}_{i,\text{vorl}}(t^n + \Delta t, x_i). \quad (2.52)$$

resultiert. Dies ist eine lineare, partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung, die auch als Poisson-Gleichung für den Druck bezeichnet wird. Bei horizontal zyklischen Randbedingungen, die in dieser Arbeit verwendet werden, wird (2.52) mit einem Verfahren nach SCHUMANN und SWEET (1988) gelöst. Dazu wird (2.52) zunächst in den beiden horizontalen Raumrichtungen einer Fourier-Transformation unterzogen, welches mit einem FFT (Fast-Fourier-Transform)-Algorithmus realisiert ist. Das dadurch entstehende tridiagonale Gleichungssystem für den Druck wird gelöst und dieser wieder zurück transformiert (RAASCH und SCHRÖTER, 2001).

Bei Verwendung des Runge-Kutta Verfahrens dritter Ordnung zur zeitlichen Integration wird das vorläufige Geschwindigkeitsfeld zu jedem der drei Teilzeitschritte bestimmt (siehe Kap. 2.4.1). $r^{(l)}$ folgt aus der Differenz von einem zum anderen Teilzeitschritt, sodass $r^{(1)} = \alpha_2 - \alpha_1 = 1/3$, $r^{(2)} = \alpha_3 - \alpha_2 = 5/12$ und $r^{(3)} = 1 - \alpha_3 = 1/4$ und $l \in (1, 2, 3)$. Damit wird sichergestellt, dass der effektiv über den Teilzeitschritt wirkende Druck bestimmt wird (SÜHRING, 2011). Der über den gesamten Zeitschritt Δt wirkende Druck $\bar{\pi}$, wird als gewichtetes Mittel über die drei Runge-Kutta Teilzeitschritte bestimmt, wie es auch bei den Geschwindigkeitskomponenten gemacht wird. Dazu werden die Runge-Kutta Wichtungsfaktoren $\beta_{4,1}$, $\beta_{4,2}$ und $\beta_{4,3}$, so wie sie im Verfahren 2.42 verwendet werden, eingesetzt:

$$\bar{\pi}(t^n, x_i) = \frac{1}{6} \bar{\pi}^{(1)} + \frac{3}{10} \bar{\pi}^{(2)} + \frac{8}{15} \bar{\pi}^{(3)}. \quad (2.53)$$

2.5 Rand- und Anfangsbedingungen

Um die Differentialgleichungen von PALM eindeutig zu lösen, müssen zusätzlich zu den soeben beschriebenen numerischen Verfahren, geeignete Rand- und Anfangsbedingungen für die prognostischen Größen vorgegeben werden. Die Vorgabe erfolgt so, dass durch die Randbedingungen an festen Rändern physikalische Vorgaben erfüllt werden und ansonsten die Randbedingungen die Strömung möglichst wenig beeinflussen.

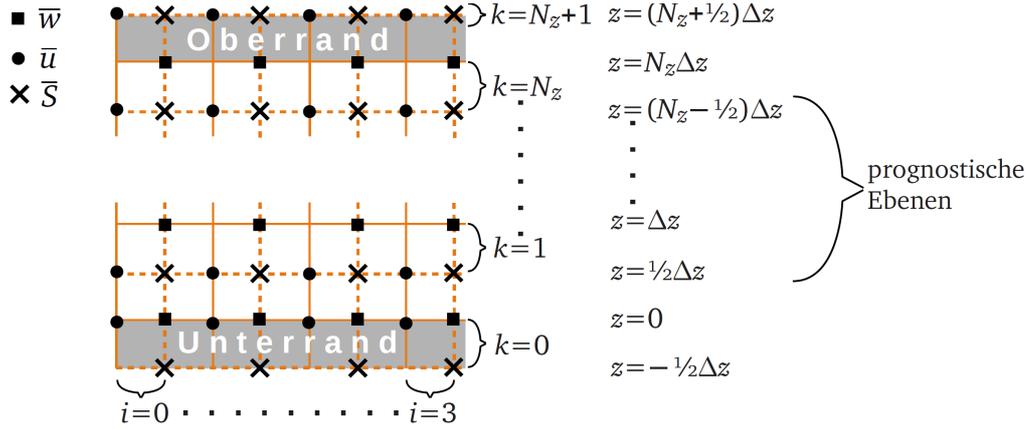


Abbildung 2.1: Variablenanordnung im versetzten Gitter von PALM im xz -Schnitt modifiziert nach GRYSCHKA (2010, S. 27). \bar{s} steht für eine skalare Variable und die Gitterpunkte in x - (z -) Richtung werden mit i (k) $\in \mathbb{N}$ durchgezählt.

An den seitlichen Rändern des Modellgebiets werden zyklische Randbedingungen vorgegeben. Dies bedeutet, dass das Modellgebiet in horizontaler Richtung periodisch unendlich fortgesetzt wird.

Der obere Modellrand befindet sich wegen des versetzten Gitters (siehe Abb. 2.1) für die Skalare und die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten bei $z_t = (N_z + 1/2)\Delta z$ und für die vertikale Komponente bei $z_t - 1/2\Delta z$, wobei N_z die Anzahl der Gitterpunkte in vertikaler Richtung angibt. Hier werden für \bar{u} , \bar{v} , \bar{w} und $\bar{\pi}$ Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben: $\bar{u}(x, y, z_t) = u_g$, $\bar{v}(x, y, z_t) = v_g$, $\bar{w}(x, y, z_t - \Delta z/2) = 0$ sowie $\bar{\pi}(x, y, z_t) = 0$. Für die SGS-TKE gilt eine Neumann-Randbedingung: $\bar{e}(x, y, z_t) = \bar{e}(x, y, z_t - \Delta z)$. Dies ist auch für die Skalare $\bar{\theta}_1$ und \bar{q} der Fall. Allerdings wird bei ihnen der Vertikalgradient vom Zeitpunkt der Initialisierung konstant gehalten:

$$\bar{\theta}_1(x, y, z_t) = \bar{\theta}_1(x, y, z_t - \Delta z) + \Delta z \left. \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial z} \right|_{z=z_t-\Delta z, t=0}, \quad (2.54)$$

$$\bar{q}(x, y, z_t) = \bar{q}(x, y, z_t - \Delta z) + \Delta z \left. \frac{\partial \bar{q}}{\partial z} \right|_{z=z_t-\Delta z, t=0}. \quad (2.55)$$

Der untere Rand des Modellgebiets bei $z = 0$ entspricht dem festen Erdboden, der damit für die Strömung undurchlässig ist. Die Geschwindigkeitskomponenten müssen wegen der undurchlässigen Berandung Haftreibungsbedingungen erfüllen. So werden für sie Dirichlet-Randbedingungen $\bar{u}(x, y, 0) = 0$, $\bar{v}(x, y, 0) = 0$ und $\bar{w}(x, y, 0) = 0$ angenommen. Aus der Forderung $\bar{w} = 0$ am Erdboden, ergibt sich für den Druck eine Neumann-Randbedingung: $\bar{\pi}(x, y, -\Delta z/2) = \bar{\pi}(x, y, \Delta z/2)$. Auch die skalaren prognostischen Variablen werden mit einer Neumann-Randbedingung behandelt, sodass sich $\bar{\psi}(x, y, -\Delta z/2) = \bar{\psi}(x, y, \Delta z/2)$ ergibt, wobei ψ für $\bar{\theta}_1$, \bar{q} oder e steht.

Zusätzlich müssen am unteren Modellrand die vertikalen turbulenten Flüsse, durch die Turbulenz angetrieben wird, vorgegeben werden. Da in der untersten Modellebene die Strömung nicht aufgelöst werden kann, entsprechen die vorzugebenden bodennahen Flüsse den SGS-Flüssen. Für die bodennahen Temperatur- und Feuchteflüsse werden an der untersten prognostischen Ebene horizontal homogene, konstante Flüsse vorgegeben: $\tau_{\theta 3}(x, y, \Delta z) = \text{const}$ sowie $\tau_{q3}(x, y, \Delta z) = \text{const}$. Die bodennahen, vertikalen Impulsflüsse τ_{13} und τ_{23} können unter der Annahme, dass sich zwischen Boden und erster Gittere-

bene eine Prandtl-Schicht einstellt, mittels der Monin-Obukhovschen Ähnlichkeitstheorie bestimmt werden. Eine ausführliche Beschreibung der in PALM implementierten Prandtl-Schicht ist z.B. STEINFELD (2008, Kap. 4.3.4) zu entnehmen. Dieser Ansatz wird bei der Simulation eine trockenen konvektiven Grenzschicht verwendet (Kap. 4.1). Die in dieser Arbeit simulierten bewölkten Grenzschichten basieren auf LES-Modellvergleichen (Kap. 4.2 und 4.3) und dort erfolgt die Vorgabe der Impulsflüsse über direkte Vorgabe einer konstanten Schubspannungsgeschwindigkeit u_* mittels

$$\tau_{13}(x, y, \Delta z) = -u_*^2 \frac{\bar{u}(x, y, 1/2\Delta z)}{(\bar{u}^2(x, y, 1/2\Delta z) + \bar{v}^2(x, y, 1/2\Delta z))^{1/2}}, \quad (2.56)$$

$$\tau_{23}(x, y, \Delta z) = -u_*^2 \frac{\bar{v}(x, y, 1/2\Delta z)}{(\bar{u}^2(x, y, 1/2\Delta z) + \bar{v}^2(x, y, 1/2\Delta z))^{1/2}}. \quad (2.57)$$

(siehe SIEBESMA *et al.*, 2003).

Die Initialisierung der dreidimensionalen prognostischen Felder erfolgt über die Vorgabe von vertikalen Profilen unter der Annahme horizontaler Homogenität. Die vorgegebenen Profile werden bei der Beschreibung der jeweiligen Simulationssetups in Kap. 4 erläutert. Um Turbulenz anzuregen, werden den Geschwindigkeitsfeldern unkorrelierte Zufallsstörungen kleiner Amplitude aufgeprägt, indem die Felder zu Beginn der Simulation mit gleichverteilten Zufallszahlen multipliziert werden. Das Aufprägen wird so lange in bestimmten zeitlichen Abständen wiederholt, bis die aufgelöste TKE einen gewissen Schwellwert überschreitet.

2.6 Parallelisierung und Hochleistungsrechner

PALM ist seit 1998 parallelisiert und für den Einsatz auf Massiv-Parallel- und Vektorrechnern optimiert. Im Zuge der Parallelisierung wurde MPI, das Message Passing Interface (siehe z.B. GROPP *et al.*, 1999) implementiert, um die Kommunikation und den Austausch von Daten der einzelnen Prozesselemente (PE) zu gewährleisten. Zusätzlich dazu kann auch OpenMP³ im Fall von Systemen mit gemeinsamem Speicher genutzt werden. Seit Mai 2012 findet außerdem eine Portierung von PALM statt, damit Graphikkartenbeschleuniger benutzt werden können. Dazu werden OpenACC⁴ Kompiler Direktiven verwendet. Um eine gleichmäßige Lastverteilung aller PEs zu erreichen, wird eine horizontale, ein- oder zweidimensionale Modellgebietszerlegung durchgeführt. Dann speichert jedes PE die Daten seines Teilgebiets und löst die Modellgleichungen auf seinen Gitterpunkten. Durch die Diskretisierung kann es zu lokalen Datenabhängigkeiten an den seitlichen Rändern der Teilgebiete kommen. Deshalb werden zusätzliche sog. Geisterränder zugeteilt, an denen die Werte der jeweils benachbarten PEs gespeichert werden. Der Austausch dieser Werte erfolgt dann mit MPI. Weitergehende Informationen zur Parallelisierung sind bei RAASCH und SCHRÖTER (2001) und SCHRÖTER (2003, Kap. 2.2.7) zu finden.

Die Simulationen dieser Arbeit wurden auf der SGI Altix des Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) in Hannover und Berlin durchgeführt. Für die Parallelisierung wurde MPI mit einer zweidimensionalen Gebietszerlegung verwendet.

³Nähere Informationen unter <http://www.openmp.org>.

⁴Nähere Informationen unter <http://www.openacc-standard.org>.

3 Bestimmung von Bilanzgleichungen und Druck-Kovarianzen

Bilanzgleichungen von statistischen Momenten höherer Ordnung stellen die Basis für Turbulenzmodelle dar. Die Herleitung von Bilanzgleichungen und ihre Bestimmung im LES-Modell sowie die physikalische Bedeutung der Bilanzterme wird in Abschnitt 3.1 verdeutlicht. Eine ausführliche Beschreibung und Herleitung von Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung findet sich außerdem z.B. bei STULL (1988, Kap. 4, Kap. 5), POPE (2000, Kap. 11) oder WYNGAARD (2010, Kap. 5).

Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen sind im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung von zentraler Bedeutung. Der herkömmliche Modellierungsansatz sieht eine Zerlegung der Kovarianzen und separate Parametrisierung der Anteile, die sich aus der Zerlegung ergeben, vor. Um diese Kovarianzen eingehend untersuchen und LES-Daten mit Parametrisierungen vergleichen zu können, wird in Abschnitt 3.2 aufgezeigt, wie die Zerlegung durchgeführt wird und die Anteile im LES-Modell bestimmt werden.

3.1 Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung

Turbulenzmodelle basieren auf Ensemble-gemittelten Bilanzgleichungen von statistischen Momenten höherer Ordnung (MIRONOV, 2009, S. 165). Dabei gibt das Ensemble-Mittel einer Größe

$$\hat{\psi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{\tilde{\alpha}=1}^{n_e} \psi(x_i, t; \tilde{\alpha}) \quad (3.1)$$

den Grenzwert über eine große Anzahl n_e von unabhängigen Realisationen $\tilde{\alpha}$ des Strömungsfeldes an und stellt eine geeignete Form dar, ein Mittel über eine instationäre Strömung zu bilden (z.B. WYNGAARD, 2010, S. 30; HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 17). Diese Form der Mittelung ist aber für atmosphärische Strömungen nur in wenigen Fällen zugänglich, weil sie sehr aufwendig zu bestimmen ist. Deshalb wird häufig auf zeitliche oder räumliche Mittelungen zurückgegriffen. Damit ein zeitliches oder räumliches Mittel einer instationären Strömung eine gute Näherung an das Ensemble-Mittel ergibt, müssen die integralen Zeit- bzw. Längenskalen der Strömung klein gegenüber den Mittelungszeiträumen bzw. -volumina sein (z.B. LUMLEY und PANOFKY, 1964, Kap. 1.15; WYNGAARD, 2010, Kap. 2.4). Im Zusammenhang mit Statistiken aus LES-Simulationen ergibt das Mittel über eine genügend große horizontale Modellebene eine gute Schätzung für das Ensemble-Mittel (z.B. SCHMIDT und SCHUMANN, 1989; WYNGAARD, 2010, S. 38) und wird daher in der vorliegenden Arbeit verwendet, um statistische Größen zu bestimmen. Das horizontale Mittel eines mit LES erzeugten, gefilterten Feldes $\bar{\psi}$ wird über

$$\langle \bar{\psi} \rangle = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \bar{\psi}(i \cdot \Delta x, j \cdot \Delta y, z, t) \quad (3.2)$$

bestimmt, wobei N_x und N_y die Anzahl der Gitterpunkte in x- und y-Richtung angeben. Die Abweichung vom horizontalen Mittel wird mit $\bar{\psi}'' = \bar{\psi} - \langle \bar{\psi} \rangle$ bezeichnet.

Das horizontale Mittel erfüllt ebenso wie das Ensemble-Mittel die Regeln der Reynolds-Mittelung (REYNOLDS, 1895). Diese Regeln werden z.B. bei STULL (1988, S. 41) oder ETLING (2002, S. 254) erläutert und besagen, dass

$$\langle\langle\psi\rangle\rangle = \langle\psi\rangle, \quad (3.3)$$

$$\langle\psi''\rangle = 0, \quad (3.4)$$

$$\langle\psi + \xi\rangle = \langle\psi\rangle + \langle\xi\rangle, \quad (3.5)$$

$$\langle\psi\xi\rangle = \langle\psi\rangle\langle\xi\rangle + \langle\psi''\xi''\rangle, \quad (3.6)$$

$$\langle\langle\psi\rangle\xi''\rangle = 0, \quad (3.7)$$

$$\left\langle\frac{\partial}{\partial x_i}\psi\right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i}\langle\psi\rangle \quad (3.8)$$

gilt, wobei ψ und ξ zwei beliebige Variablen darstellen.

Aufgrund der Filterung der Navier-Stokes-Gleichungen (siehe Abschnitt 2.2), wird eine Variable ψ in einen aufgelösten und einen subskaligen Anteil zerlegt, sodass $\psi = \overline{\psi} + \psi'$ gilt. Die Grobstruktur $\overline{\psi}$ wird berechnet und die Feinstruktur ψ' mit dem Subskalmodell parametrisiert. Durch die Filterung wird auch eine Bilanzgleichung in aufgelöste und SGS-Bilanz zerlegt, sodass $\partial\psi/\partial t = \partial\overline{\psi}/\partial t + \partial\psi'/\partial t$ gilt. Werden nun Bilanzen von Momenten höherer Ordnung mit LES untersucht, so ist die gängige Herangehensweise nur die aufgelösten Bilanzen zu bestimmen (siehe z.B. MOENG, 1986; CUIJPERS *et al.*, 1996; NEGGERS *et al.*, 2007) und die SGS-Bilanzen zu vernachlässigen. KHANNA (1998), MIRONOV *et al.* (2000) und MIRONOV (2001) zeigen aber, dass eine gute Schließung der Bilanzen der skalaren Flüsse bei moderater Auflösung nur erzielt werden kann, wenn auch die SGS-Anteile der Druck-Skalar-Kovarianzen berücksichtigt werden, die vor allem in Bodennähe einen signifikanten Einfluss ausüben (siehe auch Abb. 5.3). Gute Schließung bedeutet in diesem Zusammenhang, dass die Bilanzen kleine Residuen gegenüber den maßgeblichen Bilanztermen aufweisen. Das Residuum einer Bilanz wird als Summe aller Bilanzterme bestimmt, welche im analytischen Fall Null ist. Damit zeigt ein kleines Residuum an, dass die numerisch bestimmten Bilanzterme sich in guter Näherung gegenseitig aufheben. Residuen einzelner Bilanzgleichungen werden ausführlich in Kap. 5.1 diskutiert. Um nun in der vorliegenden Arbeit die zu untersuchenden Bilanzgleichungen mit höchstmöglicher Genauigkeit zu bestimmen, werden neben den aufgelösten Bilanzen auch die SGS-Anteile berücksichtigt. Im Anhang A.1 wird am Beispiel der Bilanzgleichung der skalaren Varianz ausführlich hergeleitet, wie diese Berücksichtigung erfolgt.

MIRONOV *et al.* (2000) und MIRONOV (2001) folgend, wird in dieser Arbeit das horizontale Mittel der gesamten (aufgelöste und SGS) Bilanz als Näherung an das Ensemble-Mittel betrachtet. Zusätzlich zur horizontalen Mittelung erfolgt anschließend noch eine zeitliche Mittelung der Bilanzterme, um die statistische Signifikanz der Momente zu erhöhen (z.B. CHLOND und WOLKAU, 2000).

Zusammengefasst lässt sich eine Variable ψ also in das horizontale Mittel der gefilterten Größe, der Abweichung von der gefilterten Größe im horizontalen Mittel sowie dem SGS-Anteil zerlegen, sodass

$$\psi = \langle\overline{\psi}\rangle + \overline{\psi}'' + \psi' \quad (3.9)$$

gilt. Bezeichnet $\psi' = \widehat{\psi} - \psi$ die Abweichung vom Ensemble-Mittel, kann ein Moment zweiter Ordnung im Ensemble-Mittel über $\psi'\chi'$ ausgedrückt werden. Eine Näherung an ein Ensemble-gemittelttes Moment zweiter Ordnung wird in dieser Arbeit durch horizontale Mittelung des gefilterten und des SGS-Moments erzielt:

$$\widehat{\psi'\chi'} \approx \langle\overline{\psi}''\overline{\chi}''\rangle + \langle\overline{\psi'}\overline{\chi'}\rangle. \quad (3.10)$$

Die Approximation eines Moments dritter Ordnung $\widehat{\psi' \chi' \xi'}$ lautet

$$\overline{\chi' \chi' \xi'} \approx \langle \overline{\psi'' \chi'' \xi''} \rangle + \langle \overline{\psi'' \chi' \xi''} \rangle + \langle \overline{\chi'' \psi' \xi''} \rangle + \langle \overline{\xi'' \chi' \psi''} \rangle + \langle \overline{\psi' \chi' \xi'} \rangle, \quad (3.11)$$

wobei ψ , χ und ξ drei beliebige Variablen darstellen sollen.

Die Bilanzgleichungen können aufgrund der in PALM verwendeten zyklischen Randbedingungen an den lateralen Rändern und der Inkompressibilität vereinfacht behandelt werden. Die zyklischen Randbedingungen führen zu einer horizontalen Homogenität, die sich über das Verschwinden der partiellen Ableitungen in x- und y-Richtung äußert: $\partial/\partial x_1 \langle \dots \rangle = \partial/\partial x_2 \langle \dots \rangle = 0$. Zum anderen verschwindet das horizontale Mittel der Vertikalgeschwindigkeit ($\langle \overline{u_3} \rangle = 0$) bei Inkompressibilität und zyklischen Randbedingungen. Die sich daraus ergebenden Vereinfachungen werden exemplarisch im Anhang A.1 dargelegt und in der nachfolgenden Beschreibung der Bilanzgleichungen verwendet.

3.1.1 Impulsflüsse und Geschwindigkeitsvarianzen

Die Bilanzgleichung für die aufgelösten Impulsflüsse (multipliziert mit Massen- und pro Volumeneinheit) $\langle \overline{u'_i u'_j} \rangle$ folgt aus der Bewegungsgleichung 2.18 indem zunächst eine Gleichung für $\overline{u'_i}$ durch Abzug der horizontal gemittelten Bewegungsgleichung von (2.18) erfolgt. Die Gleichung für $\overline{u'_i}$ wird mit $\overline{u'_j}$ multipliziert. Daraufhin wird die Gleichung für $\overline{u'_j}$ mit $\overline{u'_i}$ multipliziert. In einem dritten Schritt werden die zwei soeben beschriebenen Gleichungen addiert. Eine analoge Vorgehensweise führt zur Bilanz des SGS-Impulsflusses τ_{ij} , die z.B. bei LILLY (1967) oder DEARDORFF (1973) behandelt wird. Werden die aufgelöste und die SGS-Bilanzgleichung addiert und horizontal gemittelt sowie horizontale Homogenität und $\langle \overline{u_3} \rangle = 0$ vorausgesetzt, folgt

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \langle \overline{u'_i u'_j} \rangle + \langle \tau_{ij} \rangle}_{\mathcal{M}_{ij}} &= - \underbrace{\left[(\langle \overline{u'_j u'_3} \rangle + \langle \tau_{j3} \rangle) \frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_3} + (\langle \overline{u'_i u'_3} \rangle + \langle \tau_{i3} \rangle) \frac{\partial \langle \overline{u_j} \rangle}{\partial x_3} \right]}_{\mathcal{G}_{ij}} \\ &+ \underbrace{\frac{g}{\theta_0} \delta_{i3} \left(\langle \overline{u'_j \theta'_v} \rangle + \langle \tau_{vj} \rangle \right) + \frac{g}{\theta_0} \delta_{j3} \left(\langle \overline{u'_i \theta'_v} \rangle + \langle \tau_{vi} \rangle \right)}_{\mathcal{B}_{ij}} \\ &- \underbrace{\left[\epsilon_{ilk} f_l \left(\langle \overline{u'_k u'_j} \rangle + \langle \tau_{jk} \rangle \right) + \epsilon_{jlk} f_l \left(\langle \overline{u'_k u'_i} \rangle + \langle \tau_{ik} \rangle \right) \right]}_{\mathcal{C}_{ij}} \\ &- \underbrace{w_s \left[\left\langle \left(\delta_{i1} \overline{u'_j} + \delta_{j1} \overline{u'_i} \right) \frac{\partial \overline{u'_1}}{\partial x_3} \right\rangle + \left\langle \left(\delta_{i2} \overline{u'_j} + \delta_{j2} \overline{u'_i} \right) \frac{\partial \overline{u'_2}}{\partial x_3} \right\rangle \right]}_{\mathcal{W}_{ij}} \\ &- \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_3} \left(\langle \overline{u'_3 u'_i u'_j} \rangle + \langle \overline{u'_3 \tau'_{ij}} \rangle + \langle \overline{u'_j \tau'_{i3}} \rangle + \langle \overline{u'_i \tau'_{j3}} \rangle + \langle \overline{u'_3 u'_i u'_j} \rangle \right)}_{\mathcal{T}_{ij}^i} \\ &- \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \left(\left\langle \overline{u'_i \frac{\partial p''}{\partial x_j}} \right\rangle + \left\langle \overline{u'_j \frac{\partial p''}{\partial x_i}} \right\rangle \right)}_{\tilde{\phi}_{ij}} - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \left(\left\langle \overline{u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right\rangle + \left\langle \overline{u'_j \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right\rangle \right)}_{\tilde{\mathcal{F}}_{ij}} \\ &- \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \langle \epsilon \rangle}_{\mathcal{D}_{ij}}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Die zeitliche Änderung des totalen Impulsflusses \mathcal{M}_{ij} ergibt sich aus der Produktion¹ von Impulsfluss durch mittlere Scherung \mathcal{G}_{ij} , Auftrieb \mathcal{B}_{ij} , Corioliskraft \mathcal{C}_{ij} sowie großräumigem Absinken \mathcal{W}_{ij} . Der Term \mathcal{T}_{ij}^t beinhaltet die Divergenz vom Fluss des Impulsflusses und bewirkt einen Transport von Impulsfluss, weshalb \mathcal{T}_{ij}^t auch als turbulenter Transportterm bezeichnet wird. Turbulenter Transport führt allerdings über die gesamte Grenzschicht betrachtet nicht zur Bildung oder Vernichtung von Impulsfluss. Dies folgt aus dem Gaußschen Integralsatz, wonach das Volumenintegral über die Divergenz in ein Oberflächenintegral übergeht. Da das Geschwindigkeitsfeld bei Integration über das gesamte Strömungsvolumen auf der Oberfläche verschwindet, liefert der Transport keinen Beitrag zum Oberflächenintegral (z.B. TENNEKES und LUMLEY, 1972, S. 60). $\tilde{\phi}_{ij} + \tilde{\mathcal{F}}_{ij}$ stellt die Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz dar und \mathcal{D}_{ij} die Dissipation, welche Impulsfluss durch molekulare Reibung vernichtet. Dabei wird angenommen, dass die Dissipation auf den kleinen Skalen stattfindet, bei denen nach den Hypothesen von KOLMOGOROV (1941) lokale Isotropie herrscht. Daher wird \mathcal{D}_{ij} als isotroper Tensor, in den die Dissipationsrate ϵ der TKE eingeht, beschrieben (z.B. HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 74).

(3.12) enthält auch die Gleichungen für die Geschwindigkeitsvarianzen, welches die Komponenten auf der Hauptdiagonalen des Impulsflusstensors $\overline{u_i''u_j''} + \tau_{ij}$ sind.

Da die physikalische Bedeutung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{ij} + \tilde{\mathcal{F}}_{ij}$ nicht offensichtlich ist, wird diese Kovarianz häufig noch weiter aufgespalten (z.B. POPE, 2000, S. 388). Aus der Anwendung der Produktregel ergibt sich die am häufigsten verwendete Aufspaltung

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{ij} + \tilde{\mathcal{F}}_{ij} = & \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_k} (\delta_{jk} \langle \overline{u_i'' \overline{p}''} \rangle + \delta_{ik} \langle \overline{u_j'' \overline{p}''} \rangle)}_{\mathcal{T}_{ij}^p} + \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_k} (\delta_{jk} \langle \overline{u_i' p'} \rangle + \delta_{ik} \langle \overline{u_j' p'} \rangle)}_{\mathcal{T}_{ij}^{p,sg}} \\ & - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \langle \overline{p''} \left(\frac{\partial \overline{u_i''}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j''}}{\partial x_i} \right) \rangle}_{\Pi_{ij}} - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \langle \overline{p'} \left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} \right) \rangle}_{\mathcal{P}_{ij}}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Die Kovarianz aus Geschwindigkeit und Druckgradient kann also in die Divergenz des Druckflusses $\mathcal{T}_{ij}^p + \mathcal{T}_{ij}^{p,sg}$, welches analog zu \mathcal{T}_{ij}^t den Transport durch Druckfluktuationen darstellt, und in die Druck-Deformation $\Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij}$ zerlegt werden. Die Druck-Deformation ist bei inkompressiblen Strömungen spurlos und ändert somit die Summe aller Geschwindigkeitsvarianzen, welche proportional zur turbulenten kinetischen Energie ist, nicht. $\Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij}$ verteilt die TKE zwischen den einzelnen Normalkomponenten um (z.B. GROTH, 1991). Dieser Prozess versucht also, die Strömung in einen isotropen Zustand zurück zu führen (STULL, 1988, S. 123). Daher wird $\Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij}$ im Englischen auch als *return-to-isotropy*-Term bezeichnet. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die Zerlegung 3.13 nicht eindeutig ist, welches in Abschnitt 6.3 behandelt wird.

Die SGS-Impulsflüsse $\langle \tau_{ij} \rangle$ werden über (2.24) mit Hilfe des Subskalenmodells bestimmt. Die Auftriebsflüsse $\langle \tau_{vi} \rangle = \langle K_1 \tau_{\theta i} \rangle + \langle K_2 \tau_{qi} \rangle$ ergeben sich aus der Verallgemeinerung von (2.32) in alle drei Raumrichtungen. Die SGS-Druckflüsse $\langle \overline{u_i' p'} \rangle$ und damit auch $\mathcal{T}_{ij}^{p,sg}$ sowie die SGS-Dreifachkorrelationen $\langle \overline{u_3' u_i' u_j'} \rangle$, welche den SGS-Fluss von $\langle \tau_{ij} \rangle$ darstellen, können mit PALM nicht bestimmt werden, weil das Subskalenmodell keine Gleichungen dafür trägt. Sie werden daher als klein angenommen, welches mit Annahmen von

¹Im Folgenden wird der Begriff *Produktion* stellvertretend für Bildung bzw. Vernichtung von Momenten zweiter Ordnung durch den jeweiligen Prozess verwendet.

DEARDORFF (1973) übereinstimmt. Die subskalige Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz \mathcal{P}_{ij} wird mittels einer Parametrisierung abgeschätzt, die sich basierend auf MIRONOV (2001) aus der abgebrochenen Bilanzgleichung von $\langle \tau_{ij} - 2/3 e \delta_{ij} \rangle$ ergibt und in Anhang A.2 beschrieben wird. Als Abschätzung für die TKE Dissipationsrate $\langle \epsilon \rangle$ dient Gl. 2.31 des Subskalenmodells.

Mit der Zerlegung 3.13 ergibt sich schließlich die Impulsflussbilanz 3.12 in symbolischer Form zu

$$\mathcal{M}_{ij} = -\mathcal{G}_{ij} + \mathcal{B}_{ij} - \mathcal{C}_{ij} - \mathcal{W}_{ij} - \mathcal{T}_{ij}^t - \mathcal{T}_{ij}^p + \Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij} - \mathcal{D}_{ij}. \quad (3.14)$$

3.1.2 Turbulente kinetische Energie

Die Transportgleichung für die totale TKE, die über

$$\text{TKE} = \frac{1}{2} \langle \overline{u_i'^2} \rangle + \langle e \rangle \quad (3.15)$$

definiert ist, folgt aus Addition der Hauptdiagonalelemente von (3.14) dividiert durch zwei, welches äquivalent dazu ist, die Spur von (3.14) mit $1/2$ zu multiplizieren, sowie der Definition $e = \frac{1}{2} \tau_{ii}$ zu

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \langle \overline{u_i'^2} \rangle + \langle e \rangle \right)}_{\mathcal{M}_{\text{TKE}}} &= - \underbrace{\left(\langle \overline{u_3' u_i''} \rangle + \langle \tau_{3i} \rangle \right) \frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_3}}_{\mathcal{S}_{\text{TKE}}} + \underbrace{\frac{g}{\theta_0} \left(\langle \overline{u_3' \overline{\theta}_v''} \rangle + \langle \tau_{v3} \rangle \right)}_{\mathcal{B}_{\text{TKE}}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{2} w_s \left[\frac{\partial}{\partial x_3} \langle \overline{u_1'^2} \rangle + \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \overline{u_2'^2} \rangle \right]}_{\mathcal{W}_{\text{TKE}}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_3} \left[\frac{1}{2} \langle \overline{u_3' u_i'^2} \rangle + \langle \overline{u_3' e''} \rangle + \langle \overline{u_i' \tau_{i3}''} \rangle + \langle \overline{u_3' e'} \rangle \right]}_{\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \overline{u_3' p''} \rangle + \langle \overline{u_3' p'} \rangle \right]}_{\mathcal{T}_{\text{TKE}}^p} - \underbrace{\langle \epsilon \rangle}_{\mathcal{D}_{\text{TKE}}}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Die zeitliche Änderung \mathcal{M}_{TKE} ergibt sich aus einem Zusammenspiel von Produktion durch Scherung \mathcal{S}_{TKE} und Auftrieb \mathcal{B}_{TKE} , dem Einfluss von großräumigem Absinken \mathcal{W}_{TKE} , turbulentem Transport $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ und Transport durch Druckfluktuationen $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^p$ sowie Vernichtung von TKE durch Dissipation \mathcal{D}_{TKE} .

Bei der Bestimmung der SGS-Terme in (3.16) gilt es zu beachten, dass über das Subskalenmodell der komplette subskalige Transport durch Turbulenz und Druckfluktuationen $\langle \overline{u_3' e'} + \frac{1}{\rho_0} \overline{u_3' p'} \rangle$ mit einem Gradientansatz für die SGS-TKE parametrisiert wird (siehe Gl. 2.30) und damit nicht zwischen turbulentem Transport und Transport durch Druckfluktuationen auf der Subgridskala unterschieden werden kann. Obwohl formal keine Unterscheidung möglich ist, wird (2.30) für die Auswertung im LES Modell komplett dem Transport $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^p$ durch Druckfluktuationen zugeordnet. Folglich enthält nicht $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ sondern $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^p$ den Anteil $\partial/\partial x_3 \langle \overline{u_3' e'} \rangle$. Im Unterschied zur Impulsflussbilanz können allerdings bei der TKE-Bilanz alle SGS-Terme mit Hilfe des Subskalenmodells berücksichtigt werden.

3.1.3 Skalare Flüsse

Die Transportgleichung des aufgelösten Flusses $\langle \bar{u}_i'' \bar{\theta}_1'' \rangle$ der potentiellen Flüssigwassertemperatur wird analog zur Transportgleichung für den Impulsfluss hergeleitet, die in Abschnitt 3.1.1 skizziert wird. Zunächst wird aus dem ersten Hauptsatz 2.20 eine Gleichung für $\bar{\theta}_1''$ durch Abzug des horizontal gemittelten ersten Hauptsatzes von (2.20) erhalten. Diese Gleichung wird mit \bar{u}_i'' multipliziert. Dann wird die Gleichung für \bar{u}_i'' mit $\bar{\theta}_1''$ multipliziert, beide Gleichungen addiert und anschließend horizontal gemittelt. Die Bilanzgleichung des SGS-Temperaturflusses $\tau_{\theta i}$ ist z.B. DEARDORFF (1973) zu entnehmen. Wird die SGS-Bilanzgleichung horizontal gemittelt und zu der horizontal gemittelten und gefilterten Bilanzgleichung addiert sowie horizontale Homogenität und $\langle \bar{u}_3 \rangle = 0$ verwendet, folgt

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \bar{u}_i'' \bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta i} \rangle \right)}_{\mathcal{M}_{\theta i}} &= - \underbrace{\left(\langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \rangle + \langle \tau_{i3} \rangle \right)}_{\mathcal{G}_{\theta i}^{\theta}} \frac{\partial \langle \bar{\theta}_1 \rangle}{\partial x_3} - \underbrace{\left(\langle \bar{u}_3'' \bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 3} \rangle \right)}_{\mathcal{G}_{\theta i}^u} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_3} \\
 &+ \underbrace{\frac{g}{\theta_0} \delta_{i3} \left(\langle \bar{\theta}_1'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{v\theta} \rangle \right)}_{\mathcal{B}_{\theta i}} - \underbrace{\epsilon_{ijk} f_j \left(\langle \bar{u}_k'' \bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta k} \rangle \right)}_{\mathcal{C}_{\theta i}} \\
 &- w_s \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial x_3} \langle \bar{u}_i'' \bar{\theta}_1'' \rangle - \delta_{i3} \left\langle \bar{\theta}_1'' \frac{\partial}{\partial x_3} \bar{u}_3'' \right\rangle \right]}_{\mathcal{W}_{\theta i}} - \\
 &\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \bar{u}_3'' \tau_{\theta i}'' \rangle + \langle \bar{u}_i'' \tau_{\theta 3}'' \rangle + \langle \bar{\theta}_1'' \tau_{i3}'' \rangle + \langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \bar{\theta}_1'' \rangle \right]}_{\mathcal{T}_{\theta i}} \\
 &- \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \left\langle \bar{\theta}_1'' \frac{\partial \bar{p}''}{\partial x_i} \right\rangle}_{\mathcal{II}_{\theta i}} - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \left\langle \bar{\theta}_1'' \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right\rangle}_{\mathcal{P}_{\theta i}} + \underbrace{\langle \bar{u}_i'' \bar{Q}_{\theta}'' \rangle}_{\mathcal{Q}_{\theta i}}.
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

$\mathcal{M}_{\theta i}$, welches die zeitliche Änderung des Temperaturflusses ist, stellt sich aufgrund der Produktion von Temperaturfluss durch den mittleren vertikalen Gradienten $\mathcal{G}_{\theta i}^{\theta}$ der Temperatur sowie dem mittleren vertikalen Gradienten $\mathcal{G}_{\theta i}^u$ der Geschwindigkeit ein. Außerdem kann Temperaturfluss durch Auftrieb $\mathcal{B}_{\theta i}$, die Corioliskraft $\mathcal{C}_{\theta i}$ und großräumiges Absinken $\mathcal{W}_{\theta i}$ produziert werden. Der turbulente Transport $\mathcal{T}_{\theta i}$ verteilt den Temperaturfluss um. Der Einfluss von turbulenten Druckfluktuationen geht über die Temperatur-Druckgradient-Kovarianz $\mathcal{II}_{\theta i} + \mathcal{P}_{\theta i}$ ein und wirkt analog zur Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz in der Impulsflussbilanz ausgleichend. Außerdem kann der Einfluss von weiteren Quell- oder Senktermen $\mathcal{Q}_{\theta i}$ einen Beitrag liefern. Mit der Annahme, dass auf den kleinen Skalen lokale Isotropie herrscht, gilt für die molekulare Dissipationsrate $\epsilon_{\theta i} = 0$ (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 74).

Die Bilanzgleichung für den totalen Fluss des Gesamtwassergehaltes $\langle \bar{u}_i'' \bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{qi} \rangle$ ergibt

sich in analoger Weise zum Fluss der potentiellen Flüssigwassertemperatur zu

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\langle \bar{u}_i'' \bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{qi} \rangle)}_{\mathcal{M}_{qi}} &= - \underbrace{(\langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \rangle + \langle \tau_{i3} \rangle)}_{\mathcal{G}_{qi}^q} \frac{\partial \langle \bar{q} \rangle}{\partial x_3} - \underbrace{(\langle \bar{u}_3'' \bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q3} \rangle)}_{\mathcal{G}_{qi}^u} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_3} \\
 &+ \underbrace{\frac{g}{\theta_0} \delta_{i3} (\langle \bar{q}'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vq} \rangle)}_{\mathcal{B}_{qi}} - \underbrace{\epsilon_{ijk} f_j (\langle \bar{u}_k'' \bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{qk} \rangle)}_{\mathcal{C}_{qi}} \\
 &- \underbrace{w_s \left[\frac{\partial}{\partial x_3} \langle \bar{u}_i'' \bar{q}'' \rangle - \delta_{i3} \left\langle \bar{q}'' \frac{\partial}{\partial x_3} \bar{u}_3'' \right\rangle \right]}_{\mathcal{W}_{qi}} \\
 &- \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \bar{q}'' \rangle + \langle \bar{u}_3'' \tau_{qi}'' \rangle + \langle \bar{u}_i'' \tau_{q3}'' \rangle + \langle \bar{q}'' \tau_{i3}'' \rangle + \langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \bar{q}'' \rangle \right]}_{\mathcal{T}_{qi}} \\
 &- \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \left\langle \bar{q}'' \frac{\partial \bar{p}''}{\partial x_i} \right\rangle}_{\mathcal{H}_{qi}} - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \left\langle \bar{q}' \frac{\partial \bar{p}'}{\partial x_i} \right\rangle}_{\mathcal{P}_{qi}} + \underbrace{\langle \bar{u}_i'' \bar{Q}_q'' \rangle}_{\mathcal{Q}_{qi}}.
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Die skalaren SGS-Flüsse $\langle \tau_{\theta i} \rangle$ und $\langle \tau_{qi} \rangle$ werden ebenso wie die SGS-Impulsflüsse mit Gradientansätzen im Subskalenmodell bestimmt (Gln. 2.25-2.26). Die SGS-Dreifachkorrelationen $\langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \bar{\theta}_1'' \rangle$ und $\langle \bar{u}_3'' \bar{u}_i'' \bar{q}' \rangle$ können mit PALM nicht bestimmt werden und gehen damit ins Residuum ein. Die subskaligen Druck-Skalar-Kovarianzen $\mathcal{P}_{\theta i}$ und \mathcal{P}_{qi} werden mittels einer auf MIRONOV (2001) basierenden Parametrisierung abgeschätzt, welche im Anhang A.2 ausführlich erläutert wird. Zu beschreiben verbleiben noch die SGS-Auftriebsterme $\langle \tau_{v\theta} \rangle = \langle \bar{\theta}_1'' \bar{\theta}_v'' \rangle$ und $\langle \tau_{vq} \rangle = \langle \bar{q}' \bar{\theta}_v'' \rangle$, die nicht vom Subskalenmodell berechnet werden und folglich abgeschätzt werden müssen. MIRONOV (2009, S. 186) leitet eine Formulierung für die SGS-Auftriebsterme her, wonach

$$\langle \tau_{v\theta} \rangle = \langle K_1 \vartheta \rangle + \langle K_2 \tau_{\theta q} \rangle, \tag{3.19}$$

$$\langle \tau_{vq} \rangle = \langle K_1 \tau_{\theta q} \rangle + \langle K_2 \kappa \rangle \tag{3.20}$$

gilt. Die Koeffizienten K_1 und K_2 werden im Subskalenmodell in Abhängigkeit vom Sättigungszustand des Gittervolumens bestimmt (siehe Abschnitt 2.3). In die Bestimmung der SGS-Auftriebsterme fließen die skalaren SGS-Varianzen $\langle \vartheta \rangle = \langle \bar{\theta}_1''^2 \rangle$ und $\langle \kappa \rangle = \langle \bar{q}'^2 \rangle$ sowie die SGS-Kovarianz $\langle \tau_{\theta q} \rangle = \langle \bar{q}' \bar{\theta}_1'' \rangle$ von Temperatur und Feuchte ein.

Eine Formulierung zur Bestimmung der SGS-Varianz ϑ kann folgendermaßen hergeleitet werden. Ausgehend von der Bilanzgleichung für die SGS-Varianz (siehe z.B. Gl. 2.6 in DEARDORFF (1973)) gilt unter der Annahme, dass sich auf der Subgridskala ein Gleichgewicht zwischen Produktion und Dissipation einstellt

$$\epsilon_\theta = -2\tau_{\theta i} \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_i}. \tag{3.21}$$

Wird der Gradient der Temperatur $\frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_i}$ über den Gradientensatz 2.25 durch den SGS-Fluss $\tau_{\theta i}$ ersetzt und gleich der in DEARDORFF (1973, Gl. 3.4) verwendeten Parametrisierung

$$\epsilon_\theta = c_\theta \frac{e^{1/2}}{\Delta} \vartheta \tag{3.22}$$

gesetzt, lässt sich die Gleichung nach ϑ zu

$$\vartheta = \tilde{c} \frac{\tau_{\theta i}^2}{e} \quad (3.23)$$

umformen. Die dimensionslose Konstante c_{θ} geht in die Konstante \tilde{c} ein. \tilde{c} wird auf den Wert $\tilde{c} = 5$ gesetzt, der aus der Betrachtung des Temperaturspektrums im Inertialbereich folgt (MOENG und WYNGAARD, 1988). Analog folgen für die SGS-Varianz des Gesamtwassergehaltes $\kappa = 5\tau_{qi}^2/e$ und für die SGS-Kovarianz $\tau_{\theta q} = 5\tau_{\theta i}\tau_{qi}/e$.

3.1.4 Skalare Varianzen und Kovarianz

Die Herleitung von Bilanzgleichungen der skalaren Varianzen und der Kovarianz aus Temperatur und Feuchte geschieht analog zu den bereits beschriebenen Bilanzgleichungen der Momente zweiter Ordnung. Eine ausführliche Herleitung der Bilanz einer skalaren Varianz wird zudem in Anhang A.1 gegeben. Werden in (A.7) für das Skalar s die potentielle Flüssigwassertemperatur θ_1 verwendet und Quellen \overline{Q}_{θ} von θ_1 berücksichtigt, folgt die Bilanzgleichung für die totale Varianz der potentiellen Flüssigwassertemperatur

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \overline{\theta_1}''^2 \rangle + \langle \vartheta \rangle)}_{\mathcal{M}_{\theta\theta}} &= - \underbrace{(\langle \overline{u_3}'' \overline{\theta_1}'' \rangle + \langle \tau_{\theta 3} \rangle)}_{\mathcal{G}_{\theta\theta}} \frac{\partial \langle \overline{\theta_1} \rangle}{\partial x_3} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_3} [\langle \overline{u_3}'' \overline{\theta_1}''^2 \rangle + \langle \overline{u_3}'' \vartheta'' \rangle + 2 \langle \overline{\theta_1}'' \tau_{\theta 3}'' \rangle + \langle \overline{u_i}'' \overline{\theta_1}''^2 \rangle]}_{\mathcal{T}_{\theta\theta}} \\ &\quad - \underbrace{\langle \epsilon_{\theta} \rangle}_{\mathcal{D}_{\theta\theta}} - \underbrace{\frac{1}{2} w_s \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \overline{\theta_1}''^2 \rangle}_{\mathcal{W}_{\theta\theta}} + \underbrace{\frac{1}{2} \langle \overline{\theta_1}'' \overline{Q}_{\theta}'' \rangle}_{\mathcal{Q}_{\theta\theta}}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die zeitliche Änderung $\mathcal{M}_{\theta\theta}$ der Temperaturvarianz wird durch die Produktion von Varianz durch den mittleren Gradienten $\mathcal{G}_{\theta\theta}$, den turbulenten Transport $\mathcal{T}_{\theta\theta}$, die Dissipation $\mathcal{D}_{\theta\theta}$ von Varianz sowie dem Einfluss von großräumigem Absinken $\mathcal{W}_{\theta\theta}$ und Quellen bzw. Senken $\mathcal{Q}_{\theta\theta}$ bestimmt.

Die Bilanzgleichung der Varianz des totalen Gesamtwassergehaltes folgt aus (A.7) durch Ersetzen des Skalars s mit dem Gesamtwassergehalt q sowie Berücksichtigung von Quellen bzw. Senken \overline{Q}_q und lautet

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \overline{q}''^2 \rangle + \langle \kappa \rangle)}_{\mathcal{M}_{qq}} &= - \underbrace{(\langle \overline{u_3}'' \overline{q}'' \rangle + \langle \tau_{q3} \rangle)}_{\mathcal{G}_{qq}} \frac{\partial \langle \overline{q} \rangle}{\partial x_3} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_3} [\langle \overline{u_3}'' \overline{q}''^2 \rangle + \langle \overline{u_3}'' \kappa'' \rangle + 2 \langle \overline{q}'' \tau_{q3}'' \rangle + \langle \overline{u_i}'' \overline{q}''^2 \rangle]}_{\mathcal{T}_{qq}} \\ &\quad - \underbrace{\langle \epsilon_q \rangle}_{\mathcal{D}_{qq}} - \underbrace{\frac{1}{2} w_s \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \overline{q}''^2 \rangle}_{\mathcal{W}_{qq}} + \underbrace{\frac{1}{2} \langle \overline{q}'' \overline{Q}_q'' \rangle}_{\mathcal{Q}_{qq}}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

wobei die einzelnen Terme dieselbe physikalische Bedeutung wie im Fall der soeben beschriebenen Temperaturvarianz haben.

Die Bilanzgleichung für die aufgelöste Kovarianz aus Temperatur und Feuchte kann in analoger Weise zur Bilanzgleichung der skalaren Flüsse (Abschnitt 3.1.3) hergeleitet werden, indem die Geschwindigkeitskomponenten \bar{u}_i durch den Gesamtwassergehalt \bar{q} ersetzt werden. Die SGS-Bilanzgleichung für die Kovarianz ist z.B. DEARDORFF (1974a) zu entnehmen. Addition von aufgelöster und SGS-Bilanz, Mittelung, horizontale Homogenität sowie $\langle \bar{u}_3 \rangle = 0$ liefern

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \bar{q}'\bar{\theta}'_1 \rangle + \langle \tau_{\theta q} \rangle \right)}_{\mathcal{M}_{q\theta}} &= - \underbrace{\left(\langle \bar{u}'_3 \bar{\theta}'_1 \rangle + \langle \tau_{\theta 3} \rangle \right) \frac{\partial \langle \bar{q} \rangle}{\partial x_3}}_{\mathcal{G}_{q\theta}^a} - \underbrace{\left(\langle \bar{u}'_3 \bar{q}' \rangle + \langle \tau_{q 3} \rangle \right) \frac{\partial \langle \bar{\theta}_1 \rangle}{\partial x_3}}_{\mathcal{G}_{q\theta}^\theta} - \\
 &\quad \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \bar{u}'_3 \bar{q}' \bar{\theta}'_1 \rangle + \langle \bar{u}'_3 \tau'_{\theta q} \rangle + \langle \bar{q}' \tau'_{\theta 3} \rangle + \langle \bar{\theta}'_1 \tau'_{q 3} \rangle + \langle \bar{u}'_i \bar{q}' \bar{\theta}'_1 \rangle \right]}_{\mathcal{T}_{q\theta}} \quad (3.26) \\
 &\quad - \underbrace{2 \langle \epsilon_{\theta q} \rangle}_{\mathcal{D}_{q\theta}} - \underbrace{w_s \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \bar{\theta}'_1 \bar{q}' \rangle}_{\mathcal{W}_{q\theta}} + \underbrace{\langle \bar{q}' \bar{Q}'_\theta \rangle + \langle \bar{\theta}'_1 \bar{Q}'_q \rangle}_{\mathcal{Q}_{q\theta}}.
 \end{aligned}$$

$\mathcal{M}_{q\theta}$ gibt die zeitliche Änderung der Kovarianz an. Sie stellt sich durch ein Zusammenspiel von Produktion von Kovarianz durch die mittleren Gradienten des Gesamtwassergehaltes $\mathcal{G}_{q\theta}^a$ und der Temperatur $\mathcal{G}_{q\theta}^\theta$, dem turbulenten Transport $\mathcal{T}_{q\theta}$ von Kovarianz, der molekularen Destruktion $\mathcal{D}_{q\theta}$ sowie dem Einfluss von großräumigem Absinken $\mathcal{W}_{q\theta}$ und Quellen $\mathcal{Q}_{q\theta}$ ein.

Die in Gln. 3.24-3.26 verwendeten SGS-Flüsse $\langle \tau_{\theta 3} \rangle$ und $\langle \tau_{q 3} \rangle$ werden über das Subskalmodell bestimmt. Die Abschätzung der SGS-Varianzen $\langle \vartheta \rangle$ und $\langle \kappa \rangle$ und SGS-Kovarianz $\langle \tau_{\theta q} \rangle$ werden im vorherigen Abschnitt 3.1.3 beschrieben. Analog zu den bisher diskutierten Bilanzen können auch bei den Varianzen und der Kovarianz die SGS-Dreifachkorrelationen $\langle \bar{u}'_i \bar{\theta}'_1{}^2 \rangle$, $\langle \bar{u}'_i \bar{q}'^2 \rangle$ und $\langle \bar{u}'_i \bar{q}' \bar{\theta}'_1 \rangle$ mit PALM nicht bestimmt werden und gehen damit ins Residuum ein. Die Dissipationsraten werden unter der Annahme abgeschätzt, dass auf der Subgridskala lokale Isotropie herrscht und sich ein Gleichgewicht zwischen Produktion durch den mittleren Gradienten und Dissipation einstellt. Wird dann in (3.21) der SGS-Fluss $\tau_{\theta i}$ mit Hilfe des Gradientensatzes 2.25 ausgedrückt, folgt

$$\langle \epsilon_{\theta} \rangle = \left\langle 2K_h \left(\frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle. \quad (3.27)$$

Analog ergeben sich $\langle \epsilon_q \rangle = \left\langle 2K_h \left(\frac{\partial \bar{q}}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle$ sowie $\langle \epsilon_{\theta q} \rangle = \left\langle K_h \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_i} \right\rangle$ (siehe auch PELTIER und WYNGAARD, 1995).

3.1.5 Technische Umsetzung im LES-Modell

Die Berechnung der soeben beschriebenen Bilanzterme im LES-Modell erfordert die Ausgabe zusätzlicher Größen, die nicht zur Standardausgabe von PALM gehören. Die Bilanzterme werden über horizontale und zeitliche Mittelung als Näherung des Ensemble-Mittels direkt im LES-Modell bestimmt, wodurch die Ausgabe und Speicherung großer Datenmengen vermieden wird.

Die horizontal und zeitlich gemittelten Momente höherer Ordnung und die Bilanzterme werden unter Benutzung der in PALM vorgegebene Struktur bestimmt, indem nutzer-eigene Profile in den Modulen `user_statistics.f90` und `flow_statistics.f90` berechnet

werden. Dabei werden die Bilanzterme auf dem w-Gitter (siehe Abb. 2.1) berechnet, um so wenig wie möglich auf Interpolationen zurückgreifen zu müssen.

3.2 Zerlegung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen

Die Modellierung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen ist im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung von besonderer Wichtigkeit (siehe Abschnitt 1.3). Herkömmlicherweise werden dazu die Kovarianzen in verschiedene Anteile zerlegt und dann separat modelliert (z.B. LAUNDER *et al.*, 1975; LUMLEY, 1978; ZEMAN, 1981; POPE, 2000, S. 390f). Dabei stellen sich Anteile aufgrund von turbulenten Interaktionen (T), Scherung (S), Auftrieb (B) und Corioliskraft (C) ein. Wird die Zerlegung auf die aufgelösten Kovarianzen $\Pi_{ij} = \frac{1}{\rho_0} \left\langle \bar{p}'' \left(\frac{\partial \bar{u}_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j''}{\partial x_i} \right) \right\rangle$ und $\Pi_{si} = \frac{1}{\rho_0} \left\langle \bar{s}'' \frac{\partial \bar{p}''}{\partial x_i} \right\rangle$ angewendet, folgt

$$\Pi_{ij} = \Pi_{ij}^T + \Pi_{ij}^S + \Pi_{ij}^B + \Pi_{ij}^C + \Pi_{ij}^{SG} + \Pi_{ij}^{SU}, \quad (3.28)$$

$$\Pi_{si} = \Pi_{si}^T + \Pi_{si}^S + \Pi_{si}^B + \Pi_{si}^C + \Pi_{si}^{SG} + \Pi_{si}^{SU}, \quad (3.29)$$

wobei s stellvertretend für die Skalare θ_1 und q steht. Hier sei erwähnt, dass sich durch die Verwendung von LES noch ein Anteil der Druck-Kovarianzen aufgrund der SGS-Impulsflüsse (SG) ergibt (siehe auch MIRONOV, 2001) und dass großräumiges Absinken (SG) einen kleinen Beitrag liefert, wie in Kap. 6.2 und 6.4 gezeigt wird.

Um nun gängige Parametrisierungen für die einzelnen Anteile mittels LES überprüfen zu können, wie z.B. bei MOENG und WYNGAARD (1986) oder ANDRÉN und MOENG (1993), ist es erforderlich, die einzelnen Anteile im LES-Modell zu bestimmen. Dazu werden die Anteile von Π_{ij} und Π_{si} durch Verwendung der entsprechenden Anteile der aufgelösten Druckfluktuation,

$$\bar{p}'' = \bar{p}_T'' + \bar{p}_S'' + \bar{p}_B'' + \bar{p}_C'' + \bar{p}_{SG}'' + \bar{p}_{SU}'' \quad (3.30)$$

berechnet. Wie die einzelnen Anteile der Druckfluktuation bestimmt werden ist bspw. bei MOENG und WYNGAARD (1986), MIRONOV (2001) oder MILES *et al.* (2004) beschrieben und wird im folgenden Abschnitt aufgezeigt.

3.2.1 Poisson-Gleichungen für Druckanteile

Um Bestimmungsgleichungen für die Anteile der Druckfluktuation zu erhalten, wird zunächst die Divergenz der gefilterten Bewegungsgleichungen 2.18 genommen und die Gleichung nach \bar{p} umgestellt. Dies führt zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial x_i^2} = & - \frac{\partial^2 (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{g}{\theta_0} \frac{\partial \bar{\theta}_v''}{\partial x_3} - \varepsilon_{ijk} f_j \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \\ & - \frac{\partial^2 \tau_{ij}}{\partial x_i \partial x_j} - w_s \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 \bar{u}_2}{\partial x_2 \partial x_3} \right), \end{aligned} \quad (3.31)$$

einer Poisson-Gleichung für den Druck \bar{p} . Anschließend wird von (3.31) die horizontal gemittelte Poisson-Gleichung abgezogen, sodass sich eine Poisson-Gleichung für die Druck-

fluktuation \bar{p}'' ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}''}{\partial x_i^2} = & \underbrace{-\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j - \langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle)}_A + \underbrace{\frac{g}{\theta_0} \frac{\partial \bar{\theta}_v''}{\partial x_3}}_B - \underbrace{\varepsilon_{ijk} f_j \frac{\partial \bar{u}_k''}{\partial x_i}}_C \\ & - \underbrace{\frac{\partial^2 \tau_{ij}''}{\partial x_i \partial x_j}}_{SG} - \underbrace{w_s \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_1''}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 \bar{u}_2''}{\partial x_2 \partial x_3} \right)}_{SU}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Die Quellterme auf der rechten Seite von (3.32) repräsentieren von links nach rechts den Einfluss von Advektion (A), Auftrieb (B), Corioliskraft (C), SGS-Effekten (SG) sowie großräumigem Absinken (SU). Der Advektionsterm wird durch das Ausführen der partiellen Ableitungen, der Anwendung der Reynoldsschen Mittelbildungsregeln (Gln. 3.3-3.8) sowie dem Ersetzen von $\bar{u}_i = \langle \bar{u}_i \rangle + \bar{u}_i''$ zu

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j - \langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle) = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\bar{u}_i'' \bar{u}_j'' - \langle \bar{u}_i'' \bar{u}_j'' \rangle)}_T + 2 \underbrace{\frac{\partial \bar{u}_j''}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j}}_S \quad (3.33)$$

umgeformt. Der erste Term auf der rechten Seite von (3.33) beschreibt einen Quellterm aufgrund von Interaktionen von Turbulenz (T). Der zweite Term enthält den Gradienten der mittleren Geschwindigkeit und ist damit ein Quellterm aufgrund von mittlerer Scherung (S).

Nach Einsetzen von (3.33) in die Poisson-Gleichung 3.32 folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}''}{\partial x_i^2} = & -\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\bar{u}_i'' \bar{u}_j'' - \langle \bar{u}_i'' \bar{u}_j'' \rangle) - 2 \frac{\partial \bar{u}_j''}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{g}{\theta_0} \frac{\partial \bar{\theta}_v''}{\partial x_3} \\ & - \varepsilon_{ijk} f_j \frac{\partial \bar{u}_k''}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 \tau_{ij}''}{\partial x_i \partial x_j} - w_s \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_1''}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 \bar{u}_2''}{\partial x_2 \partial x_3} \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Diese Gleichung ist linear in \bar{p}'' , weshalb sie sich in Bestimmungsgleichungen für die einzelnen Druckanteile zerlegen lässt, indem in (3.34) wechselseitig alle bis auf jeweils einen Quellterm Null gesetzt werden:

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_T''}{\partial x_i^2} = -\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\bar{u}_i'' \bar{u}_j'' - \langle \bar{u}_i'' \bar{u}_j'' \rangle), \quad (3.35)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_S''}{\partial x_i^2} = -2 \frac{\partial \bar{u}_j''}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j}, \quad (3.36)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_B''}{\partial x_i^2} = \frac{g}{\theta_0} \frac{\partial \bar{\theta}_v''}{\partial x_3}, \quad (3.37)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_C''}{\partial x_i^2} = -\varepsilon_{ijk} f_j \frac{\partial \bar{u}_k''}{\partial x_i}, \quad (3.38)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_{SG}''}{\partial x_i^2} = -\frac{\partial^2 \tau_{ij}''}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (3.39)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_{SU}''}{\partial x_i^2} = -w_s \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_1''}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 \bar{u}_2''}{\partial x_2 \partial x_3} \right). \quad (3.40)$$

Somit liefert das Lösen der Poisson-Gleichungen 3.35-3.40 die Druckanteile, die dann in den Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen Π_{ij} und Π_{si} verwendet werden, um deren einzelne Anteile zu bestimmen. Um die einzelnen Anteile der Druckfluktuation im LES-Modell zu erhalten, müssen Erweiterungen in den Quellcode von PALM eingebracht werden, die nachfolgend erläutert werden.

3.2.2 Bestimmung der Druckanteile im LES-Modell

Die Zerlegung der Druckfluktuation ist linear (siehe Gl. 3.30). Folglich sollte auch die Summe der zu bestimmenden Druckanteile die gesamte Druckfluktuation \bar{p}'' ergeben, also Gl. 3.30 zu Maschinengenauigkeit erfüllt werden. Um dieser Forderung nach zu kommen, werden die Druckanteile im LES-Modell mit exakt denselben numerischen Verfahren wie der modifizierte Druck $\bar{\pi}$ bestimmt. Dies bedeutet, dass die Druckanteile auf Basis der in Abschnitt 2.4.3 beschriebenen Prädiktor-Korrektor Methode berechnet werden, welche das Lösen der Poisson-Gleichungen mit Hilfe einer FFT einschließt. Da im LES-Modell die Aufteilung des Advektionsanteils in Turbulenz und Scherung (siehe Gl. 3.33) nicht vorgenommen wird, wird zunächst wieder vom Advektionsanteil ausgegangen.

Zunächst werden die einzelnen Tendenzterme der Bewegungsgleichungen 2.39 aufgrund von Advektion (A), Auftrieb (B), Coriolis Effekt (C), SGS-Diffusion (SG) und großräumigem Absinken (SU) separat abgespeichert und im ersten Schritt der Prädiktor-Korrektor Methode Geschwindigkeitsfelder für jeden Anteil (\bar{u}_i^A , \bar{u}_i^B , \bar{u}_i^C , \bar{u}_i^{SG} , \bar{u}_i^{SU}) mit dem Runge-Kutta-Verfahren (siehe Abschnitt 2.4.1) prognostiziert. Dabei lauten die zu lösenden Gleichungen

$$\frac{\partial \bar{u}_i^A}{\partial t} = - \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j}, \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^B}{\partial t} = \frac{g}{\theta_0} \bar{\theta}'' \delta_{i3}, \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^C}{\partial t} = - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k - \varepsilon_{ij3} f_3 u_{gj}, \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^{SG}}{\partial t} = - \frac{\partial \tau_{ij}^r}{\partial x_j}, \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^{SU}}{\partial t} = - \delta_{i1} w_s \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3} - \delta_{i2} w_s \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x_3}. \quad (3.45)$$

Allerdings wird keine vollständige Prognose durchgeführt, sondern nur die Änderung der einzelnen Geschwindigkeitsfelder pro Zeitschritt bestimmt. Diese Information genügt, um die Quellterme für die einzelnen Poisson-Gleichungen, durch die die Druckanteile bestimmt werden, zu berechnen, wie im Folgenden gezeigt wird.

Unabhängig vom verwendeten Zeitschrittverfahren folgt das Geschwindigkeitsfeld $\bar{u}_{i,A}$ aufgrund der alleinigen Wirkung der Advektion von einem Zeitschritt zum nächsten aus

$$\bar{u}_i^A(t^n + \Delta t, x_i) = \bar{u}_i^A(t^n, x_i) + \Delta t \frac{\partial \bar{u}_i^A}{\partial t} = \bar{u}_i^A(t^n, x_i) + \Delta \bar{u}_i^A, \quad (3.46)$$

wobei $\Delta \bar{u}_i^A$ die Geschwindigkeitsänderung auf Grund von Advektion über einen Zeitschritt beschreibt. Die Divergenz von (3.46) liefert

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{u}_i^A(t^n + \Delta t, x_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{u}_i^A(t^n, x_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta \bar{u}_i^A = \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta \bar{u}_i^A, \quad (3.47)$$

weil das Geschwindigkeitsfeld $\bar{u}_i^A(t^n, x_i)$ zum aktuellen Zeitschritt bereits divergenzfrei ist. Folglich ergibt sich im zweiten Schritt der Prädiktor-Korrektor Methode als Quellterm für die Poisson-Gleichung für \bar{p}_A :

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_A}{\partial x_i^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta \bar{u}_i^A. \quad (3.48)$$

Die Quellterme für die übrigen Anteile werden in analoger Form bestimmt. Daran schließt sich die numerische Lösung von (3.48) und der übrigen Komponenten an. Dazu wird wie bei der Bestimmung des modifizierten Drucks $\bar{\pi}$ (siehe auch Abschnitt 2.4.3) zunächst eine Fourier-Transformationen in x- und y- Richtung durchgeführt, dann das resultierende tridiagonale Gleichungssystem im Fourier-Raum gelöst und anschließend eine Rücktransformation durchgeführt.

Letztlich werden mit der Prädiktor-Korrektor Methode also nicht die Fluktuationen der Druckanteile gemäß (3.36)-(3.40) bestimmt, sondern die Druckanteile selbst, indem (3.31) in seine Anteile zerlegt wird:

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_A}{\partial x_i^2} = -\frac{\partial^2 (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (3.49)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_B}{\partial x_i^2} = \frac{g}{\theta_0} \frac{\partial \bar{\theta}_v''}{\partial x_3}, \quad (3.50)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_C}{\partial x_i^2} = -\varepsilon_{ijk} f_j \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i}, \quad (3.51)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_{SG}}{\partial x_i^2} = -\frac{\partial^2 \tau_{ij}^r}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (3.52)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2 \bar{p}_{SU}}{\partial x_i^2} = -w_s \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 \bar{u}_2}{\partial x_2 \partial x_3} \right). \quad (3.53)$$

Zur Lösung der Poisson-Gleichungen müssen noch geeignete Randbedingungen vorgegeben werden. Die Vorgehensweise, die Druckanteile mit denselben numerischen Verfahren wie den modifizierten Druck $\bar{\pi}$ zu bestimmen, führt dazu, dass auch den Druckanteilen die gleichen Randbedingungen wie $\bar{\pi}$ vorgegeben werden. Dabei handelt sich um Neumann-Randbedingungen am unteren und Dirichlet-Randbedingungen am oberen Rand (vergleiche Abschnitt 2.5).

Mit der soeben erläuterten Methode kann nur der Druckanteil aufgrund des Einflusses der gesamten Advektion (A) bestimmt werden. Um die Anteile aufgrund von turbulenten Interaktionen (T) und mittlerer Scherung (S) zu separieren, wird die rechte Seite von (3.49) wie in (3.33) zerlegt, sodass

$$\frac{\partial^2 (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 \bar{u}_i'' \bar{u}_j''}{\partial x_i \partial x_j} + 2 \frac{\partial \bar{u}_j''}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j} \quad (3.54)$$

folgt. Der Druckanteil \bar{p}_S aufgrund von mittlerer Scherung erfüllt also (3.36). Die rechte Seite von (3.36) wird aus den prognostizierten Geschwindigkeitsfeldern zum aktuellen Zeitschritt bestimmt. Anschließend wird die Poisson-Gleichung gelöst. Der Druckanteil \bar{p}_T durch turbulente Interaktionen folgt aus der Differenz von Advektions- und Scherungsanteil

$$\bar{p}_T = \bar{p}_A - \bar{p}_S. \quad (3.55)$$

Mit der soeben beschriebenen Methode ergibt die Summe der Druckanteile den modifizierten Druck $\bar{\pi}$ zu Maschinengenauigkeit, wie in Kap. 6.1 gezeigt wird. Folglich gilt

$$\bar{\pi} = \bar{p}_T + \bar{p}_S + \bar{p}_B + \bar{p}_C + \bar{p}_{SG} + \bar{p}_{SU}. \quad (3.56)$$

MILES *et al.* (2004) folgend wird in (3.56) der modifizierte Druck $\bar{\pi}$ durch $\bar{p} + 2/3e$ ersetzt (siehe Gl. 2.38), sodass

$$\bar{p} = \bar{p}_T + \bar{p}_S + \bar{p}_B + \bar{p}_C + \bar{p}_{SG} - \frac{2}{3}e + \bar{p}_{SU} \quad (3.57)$$

folgt. $2/3e$ wird dem Druckanteil aufgrund von SGS-Effekten zugeordnet, wobei die Differenz $\bar{p}_{SG} - 2/3e$ nachfolgend wieder als \bar{p}_{SG} bezeichnet wird, sodass also

$$\bar{p} = \bar{p}_T + \bar{p}_S + \bar{p}_B + \bar{p}_C + \bar{p}_{SG} + \bar{p}_{SU} \quad (3.58)$$

gilt.

Die in die Kovarianzen Π_{ij}^T , Π_{ij}^S usw. einfließenden Druckfluktuationen \bar{p}_T'' , \bar{p}_S'' usw., werden durch Abzug der horizontalen Mittel von den Druckanteilen bestimmt.

Die Prognose von Geschwindigkeitsänderungen $\Delta\bar{u}_i^A$ gegenüber der vollständigen Prognose der Geschwindigkeitsfelder \bar{u}_i^A , \bar{u}_i^B usw. führt dazu, dass jeweils nur Felder von der aktuellen Zeitebene für die Prognose benötigt werden. Damit ist auch die Bestimmung der Druckanteile nicht vom vorhergehenden Zeitschritt abhängig und braucht nur dann erfolgen, wenn es die zeitliche Mittelung erfordert. Dies spart erheblich Rechenzeit ein, weil das Lösen der Poisson-Gleichungen aufwendig ist und allein die Bestimmung von $\bar{\pi}$ im Schnitt die Hälfte der Rechenzeit benötigt. Bei Testsimulationen einer trockenen, scherungsfreien Grenzschicht (siehe Abschnitt 4.1) mit $(96)^3$ Gitterpunkten auf 32 PE folgt eine Erhöhung der Gesamtrechenzeit um 250 % gegenüber einer Simulation ohne Bestimmung der Druckanteile wenn eine vollständige Prognose durchgeführt wird und die Poisson-Gleichungen zu jedem Zeitschritt gelöst werden. Dagegen erhöht sich die Rechenzeit um nur 30 % wenn die Poisson-Gleichungen nur dann gelöst werden, wenn sie aufgrund der zeitlichen Mittelung für die Profilausgaben benötigt werden.

4 Simulierte Grenzschichten und ihre Eigenschaften

Der Fokus der vorliegenden Arbeit liegt auf der Untersuchung bewölkter Grenzschichten. Damit die erzielten Ergebnisse möglichst allgemeine Rückschlüsse über Turbulenzparametrisierungen in Wettermodellen zulassen, werden die zu simulierenden Situationen so ausgewählt, dass sie einfache und dennoch realistische Fälle repräsentieren. Um die Situationen möglichst einfach zu halten, werden die Grundformen der Grenzschichtbewölkung separat in zwei Simulationen untersucht. Damit werden die typischen Basisfälle von Grenzschichtbewölkung abgedeckt. Darüber hinaus können die Situationen vor allem dann realistisch gehalten werden, wenn ihre Simulation auf Basis von beobachteten Fällen erfolgt. Die Strategie, Simulationssetups auf Basis von konkreten Beobachtungen aufzustellen, wird auch im Rahmen der GCSS-Bemühungen (siehe Abschnitt 1.3) verfolgt, woraus sich LES-Setups zur Simulation von bewölkten Grenzschichten ergeben¹. Zwei dieser Setups werden in der vorliegenden Arbeit verwendet. Die Benutzung von GCSS-Setups bringt dabei den Vorteil mit sich, dass diese Fälle im Rahmen von LES-Modellvergleichen untersucht worden sind (z.B. MOENG *et al.*, 1996; SIEBESMA *et al.*, 2003; STEVENS *et al.*, 2005; ACKERMANN *et al.*, 2009; VANZANTEN *et al.*, 2011) und auch darüber hinaus häufig simuliert worden sind (z.B. WANG und STEVENS, 2000; GOLAZ *et al.*, 2002; GRANT, 2006; NEGGERS, 2009). Damit stellen sie für diese Arbeit eine ideale Grundlage dar, weil sowohl qualitative als auch quantitative Vergleiche der Ergebnisse anderer Modelle mit PALM möglich sind und so eine gute Ausgangslage für weitergehende Untersuchungen der Bilanzen und Druck-Kovarianzen gelegt wird.

Zusätzlich zur Simulation bewölkter Grenzschichten fließen in diese Arbeit auch Simulationen einer trockenen konvektiven Grenzschicht ein. Ergebnisse dieser Simulationen werden dazu verwendet die Umsetzung der in Kap. 3 beschriebenen Methoden zur Bestimmung von Bilanzen und Zerlegung von Druck-Kovarianzen zu überprüfen.

Zunächst wird in Abschnitt 4.1 das Setup der trockenen Grenzschicht beschrieben. Anschließend folgt die Beschreibung der Setups der Kumulus-bedeckten Grenzschicht (Abschnitt 4.2) und der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht (Abschnitt 4.3), die beide einen Vergleich mit Ergebnissen anderer LES-Modelle sowie Sensitivitätsuntersuchungen bezüglich Gitterweite, Modellgebietsgröße und verwendeten numerischen Verfahren beinhalten.

4.1 Trockene konvektive Grenzschicht

Das Setup einer trockenen konvektiven Grenzschicht basiert auf MIRONOV *et al.* (2000) (Fall FC). Bei der Simulation einer trockenen Grenzschicht werden Phasenübergänge in den Grundgleichungen von PALM nicht berücksichtigt, weshalb $\bar{\theta}_1$ in $\bar{\theta}$ übergeht (siehe Gl. 2.13). Außerdem ist die Lösung der Gleichung für \bar{q} nicht erforderlich.

Die Simulation erfolgt mit einer isotropen Gitterweite von 5 m je Raumrichtung, welches

¹Übersicht über Vorhaben der Arbeitsgruppe für Grenzschichtbewölkung:
<http://www.knmi.nl/~siebesma/BLCWG/>

eine höhere Auflösung als in MIRONOV *et al.* (2000) ermöglicht, bei denen horizontale Gitterweiten von ca. 50 m und eine vertikale Gitterweite von 20 m verwendet werden. Das Modellgebiet umfasst eine Größe von 4.8 km×4.8 km×1.9 km in x-, y- bzw. z-Richtung, welches 960×960×384 Gitterpunkten entspricht. Es werden drei Stunden simuliert, wobei sich basierend auf (2.45) ein mittlerer Zeitschritt von 0.6 s einstellt.

Es werden die in Abschnitt 2.5 vorgestellten Randbedingungen für die prognostischen Größen verwendet. Nur die Bedingung für \bar{u} und \bar{v} am oberen Rand weicht davon ab. Hier wird in Übereinstimmung mit MIRONOV *et al.* (2000) eine Neumann-Randbedingung verwendet. Die bodennahen Impulsflüsse werden über die Prandtl-Schicht-Beziehung bestimmt und am unteren Rand wird ein zeitlich konstanter, horizontal homogener vertikaler Temperaturfluss $H_{\theta 0} = \tau_{\theta 3}(x, y, \Delta z) = 0.24 \text{ K m s}^{-1}$ vorgegeben. Die Simulation erfolgt ohne mittleren Wind, also $u_g = v_g = 0$.

Das Initialprofil der potentiellen Temperatur setzt sich analog zu MIRONOV *et al.* (2000) aus drei Bereichen zusammen. Vom Boden bis in eine Höhe von $z = 1000 \text{ m}$ ist die Schichtung neutral und die Temperatur beträgt 300 K. Daran schließt sich eine stark stabile Schicht mit einer Mächtigkeit von 120 m an, in der die potentielle Temperatur um 6.6 K pro 100 m zunimmt. Von 1120 m bis zum Oberrand des Modellgebiets weist der Temperaturgradient einen Wert von 0.003 K m^{-1} auf.

Um zu Beginn der Simulation Turbulenz anzuregen, wird eine unkorrelierte Zufallsstörung mit einer maximalen Amplitude von 0.25 m s^{-1} auf die horizontalen Geschwindigkeitsfelder aufgeprägt.

In dieser Simulation beträgt die mittlere Grenzschichthöhe $z_i = 1120 \text{ m}$, wobei z_i aus dem Minimum des Temperaturflussprofils bestimmt wird (DEARDORFF, 1974a). Mit der Grenzschichthöhe können für die konvektive Grenzschicht auf DEARDORFF (1970b) basierende Skalierungsparameter bestimmt werden. Die konvektiven Geschwindigkeits-, Zeit- und Temperaturskalen sind über

$$w_* = \left(\frac{g}{\theta_0} z_i H_0 \right)^{1/3}, \quad t_* = \frac{z_i}{w_*} \quad \text{und} \quad \theta_* = \frac{H_{\theta 0}}{w_*} \quad (4.1)$$

definiert und ergeben sich bei dieser Simulation zu $w_* = 2.03 \text{ m s}^{-1}$, $t_* = 531 \text{ s}$ und $\theta_* = 0.12 \text{ K}$, welches mit MIRONOV *et al.* (2000) übereinstimmt. Die zeitliche Mittelung der statistischen Momente erfolgt über die zweite und dritte Simulationsstunde, welches mehrere konvektiven Zeitskalen t_* beinhaltet. Dabei gehen über diesen Zeitraum alle 20 s instantane Felder in das Mittel ein, welches insgesamt 360 Feldern entspricht. Diese Simulation wird im Folgenden wie in MIRONOV *et al.* (2000) mit FC bezeichnet, welches sich aus dem Englischen für *free convection* ableiten lässt.

Die Profile der in MIRONOV *et al.* (2000) diskutierten Momente stimmen gut mit den aus dieser Simulation ermittelten Momenten überein. Ein detaillierter Vergleich folgt für die Bilanzen der TKE, der Temperaturvarianz und des vertikalen Temperaturflusses in Kap. 5.1. Bereits RAASCH und ETLING (1991) zeigen, dass PALM eine konvektive Grenzschicht in Übereinstimmung mit Messungen wiedergeben kann. Da die Eigenschaften einer trockenen konvektiven Grenzschicht ohne mittleren Wind durch Messungen und Simulationen hinlänglich bekannt sind, wird an dieser Stelle auf eine Diskussion verzichtet und auf DEARDORFF (1974a,b); KAIMAL *et al.* (1976); SCHMIDT und SCHUMANN (1989) und MASON (1989) verwiesen.

4.2 BOMEX – Kumulus-bedeckte Grenzschicht

Kumulus-bedeckte Grenzschichten werden im Rahmen des *Barbados Oceanographic and Meteorological Experiment* (BOMEX, HOLLAND und RASMUSSEN, 1973) untersucht. Auf Grundlage dieser Messungen, führen SIEBESMA und CUIJPERS (1995) LES durch, wobei das dort verwendete LES-Setup als Basis für die LES-Modellvergleichsstudie von SIEBESMA *et al.* (2003) dient. Dieser Fall wird auch in der vorliegenden Studie verwendet und zeichnet sich dadurch aus, dass er eine typische Grenzschicht in der Passatwindregion über dem Meer darstellt, stationär ist und nicht durch Niederschlag und mesoskalige Zirkulationsmuster überlagert wird. Daher handelt es sich um einen relativ einfachen und dennoch realistischen Fall, der somit für die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit geeignet ist.

4.2.1 Setup und Modellvergleich

Das Setup für den BOMEX-Fall ist in SIEBESMA *et al.* (2003) beschrieben und die Simulation wird eng daran angelehnt. Es wird lediglich eine feinere Gitterweite als in der Modellvergleichsstudie verwendet. Statt der Standardauflösung von $100\text{ m} \times 100\text{ m} \times 40\text{ m}$ in x-, y- bzw. z-Richtung wird eine Gitterweite von 5 m je Raumrichtung verwendet. Die Modellgebietsgröße beträgt $6.4\text{ km} \times 6.4\text{ km} \times 3.2\text{ km}$. Simuliert werden sechs Stunden mit einem mittleren Zeitschritt von 0.5 s. Die Simulation wird im Folgenden mit B05 bezeichnet.

Die Initialprofile von $\bar{\theta}_1$ und \bar{q} bestehen aus vier Schichten (siehe die gepunkteten Linien in Abb. 4.2a und 4.2b). In der Simulation wird die Grenzschicht durch einen geostrophischen Wind von $(u_g, v_g) = (-8.75\text{ m s}^{-1}, 0)$ für $z \leq 700\text{ m}$ und $(u_g, v_g) = (-8.75\text{ m s}^{-1} + 1.8 \cdot 10^{-3}\text{ s}^{-1}(z - 700)\text{ m}, 0)$ für $z > 700\text{ m}$ (siehe Abb. 4.2d und 4.2e) angetrieben. Das Initialprofil der SGS-TKE wird mit $e = (1 - z/3000)\text{ m}^2\text{ s}^{-2}$ vorgegeben.

Am unteren Rand werden konstante bodennahe Flüsse $H_{\theta 0} = 8 \cdot 10^{-3}\text{ K m s}^{-1}$ und $H_{q0} = \tau_{q3}(x, y, \Delta z) = 5.2 \cdot 10^{-5}\text{ m s}^{-1}$ vorgegeben. Die bodennahen Impulsflüsse werden nicht über die Prandtl-Schicht-Beziehungen, sondern über die Vorgabe einer Schubspannungsgeschwindigkeit von $u_* = 0.28\text{ m s}^{-1}$ mit den Gln. 2.56 und 2.57 bestimmt. Um die Symmetrie der Anfangsbedingungen zu durchbrechen und Turbulenz anzuregen, werden Zufallsstörungen bis in eine Höhe von 1600 m auf das Temperatur- und Feuchtefeld aufgeprägt. Die Amplituden betragen 0.1 K bzw. 0.025 g kg^{-1} . Bei der Simulation kommt eine Galilei-Transformation zum Einsatz, welche das Koordinatensystem mit dem geostrophischen Wind mitbewegt. Dabei beträgt die konstante Translationsgeschwindigkeit 60% des geostrophischen Windes an der Oberfläche. Auf die prognostischen Variablen wird ab einer Höhe von $z = 2900\text{ m}$ eine Rayleigh-Dämpfung angewendet. Mit dieser Dämpfung werden durch Konvektion angeregte Schwerewellen in der stabilen Schicht gedämpft, sodass Reflexion der Wellen am oberen Modellrand unterbunden wird.

Zusätzlich zum geostrophischen Wind wird bei BOMEX noch weiterer, großräumiger Antrieb berücksichtigt, welcher Absinken, Strahlung und Advektion enthält. Das Absinken wird gemäß (2.17) in den Gleichungen für \bar{u} , \bar{v} , $\bar{\theta}_1$ und \bar{q} berücksichtigt. Strahlungsabkühlung geht als Tendenz \bar{Q}_θ in den ersten Hauptsatz 2.20 über ein zeitlich invariantes Profil ein. Um den Effekt großräumiger Advektion trockenerer Luft unterhalb der Wolkenschicht zu beschreiben, wird der Erhaltungsgleichung 2.21 für \bar{q} eine entsprechende Tendenz \bar{Q}_q hinzugefügt. Die Profile der Absinkgeschwindigkeit w_s , der Strahlungsabkühlung und der Advektion trockenerer Luft sind in SIEBESMA *et al.* (2003) beschrieben.

Die geographische Breite in der Simulation beträgt $\varphi = 15^\circ$, welches der Lage von

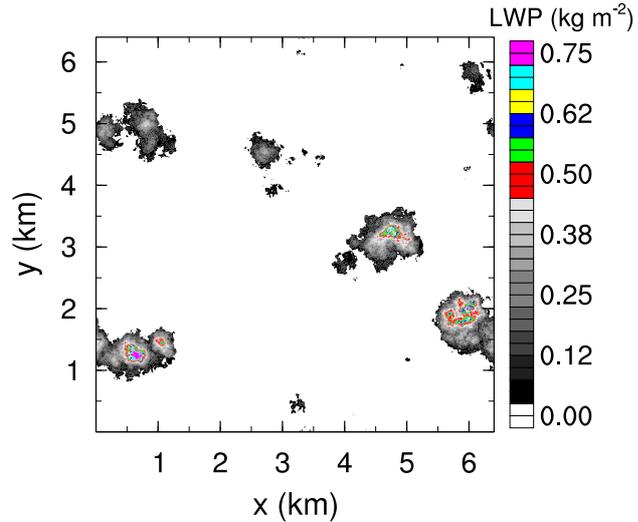


Abbildung 4.1: Isoflächendarstellung des Flüssigwasserpfad (LWP) der BOMEX Simulation B05 zum Zeitpunkt $t = 6$ h.

Barbados entspricht.

Momente zweiter und dritter Ordnung werden in Übereinstimmung mit SIEBESMA *et al.* (2003) über die letzten drei Stunden der Simulation gemittelt, nachdem die Einschwingphase vorüber ist und sich ein quasi-stationärer Zustand ausgebildet hat. In diesem Zeitraum werden alle 20s Profile bestimmt, die ins zeitliche Mittel einfließen. Die Momente erster Ordnung werden als Mittel über die letzte Simulationsstunde präsentiert, um einen direkten Vergleich mit SIEBESMA *et al.* (2003) zu ermöglichen.

Die Ergebnisse der an dieser Vergleichsstudie teilgenommenen Forschergruppen sind verfügbar² und werden wie in SIEBESMA *et al.* (2003) dargestellt. Daher enthalten die Abbildungen zusätzlich zu den mit PALM erzielten Ergebnissen das Mittel sowie die doppelte Standardabweichung der Vergleichsstudie. Insgesamt gehen Ergebnisse von 10 verschiedenen LES-Modellen in das Mittel ein, die größtenteils vergleichbare numerische Verfahren wie PALM verwenden.

RIECHELMANN *et al.* (2012) präsentieren Ergebnisse von BOMEX Simulationen mit PALM im Hinblick auf eine Validierung des in PALM verfügbaren Lagrangeschen Wolkenmodells. Ein weitergehender Vergleich der PALM Resultate mit Ergebnissen der anderen Modelle wird nachfolgend aufgezeigt, wobei zunächst die Eigenschaften der simulierten Grenzschicht vorgestellt werden.

Eine Momentaufnahme des Flüssigwasserpfad LWP in Abb. 4.1 zeigt, dass sich in der Simulation Kumulusbewölkung ausbildet. Dabei steht LWP für *Liquid Water Path*, welches den vertikal integrierten Flüssigwassergehalt darstellt und damit ein Indikator für die simulierten Wolken ist. Der Bedeckungsgrad zu diesem Zeitpunkt liegt bei ca. 23%.

Die initiale Struktur der Grenzschicht wird während der Simulation aufrecht erhalten, welches die Profile von $\bar{\theta}$ und \bar{q}_v (Abb. 4.2a und 4.2b) zeigen. Für $z < 500$ m ist die Grenzschicht gut durchmischt und wolkenfrei. Zwischen 500 m und 1500 m befindet sich eine feucht-labile Schicht, in der es zu Kondensation und Wolkenbildung kommt. Die Basis der dort entstehenden Kumuluswolken liegt bei ca. 500 m (Abb. 4.2c). Die bei der Kondensation von Wasserdampf freigesetzte, latente Wärme führt dazu, dass das Profil der potentiellen Temperatur in dieser Schicht mit der Höhe feuchtadiabatisch zunimmt und die mittlere spezifische Feuchte abnimmt. Die vertikale Ausdehnung der Kumuluswolken wird durch eine Inversionsschicht oberhalb von 1500 m begrenzt.

²Die Daten der Vergleichsstudie befinden sich unter <http://www.knmi.nl/~siebesma/gcss/bomex.html>

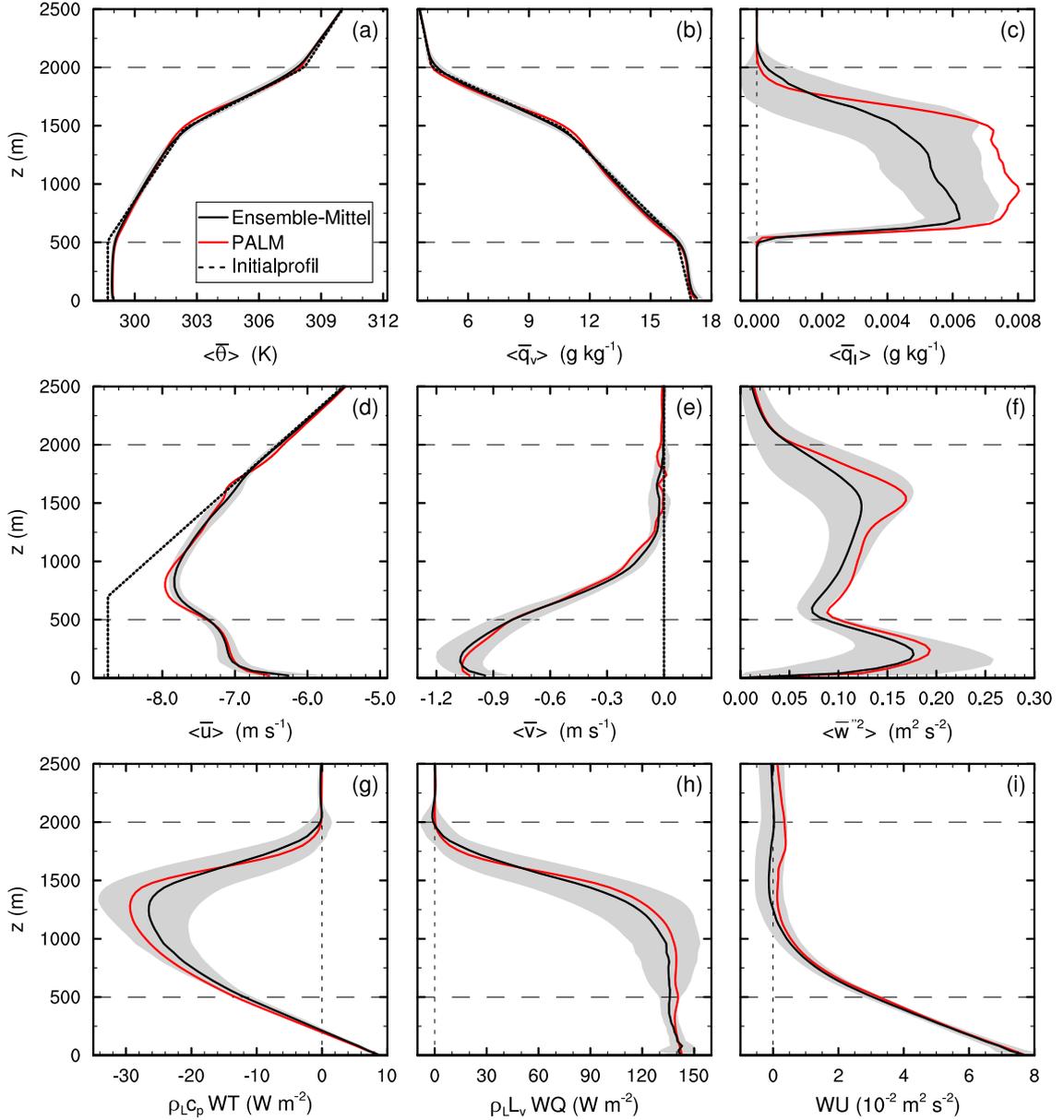


Abbildung 4.2: Vertikalprofile der potentiellen Temperatur $\bar{\theta}$ (a), der spezifischen Feuchte \bar{q}_v (b), des Flüssigwassergehalts \bar{q}_l (c), der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten \bar{u} (d) und \bar{v} (e), der aufgelösten Varianz \bar{w}'^2 der Vertikalgeschwindigkeit (f), des totalen vertikalen Flusses WT der Flüssigwassertemperatur (g), des totalen vertikalen Flusses WQ des Gesamtwassergehalts (h) und des totalen vertikalen Impulsflusses WU (i) für den BOMEX-Fall. Zur Umrechnung der kinematischen Flüsse wurde eine konstante Luftdichte $\rho_L = 1.1 \text{ kg m}^{-3}$ verwendet. Schwarze Linien zeigen den Mittelwert aller 10 Modelle an, die an der LES Vergleichsstudie teilgenommen haben und der grau unterlegte Bereich kennzeichnet die zweifache Standardabweichung des Modell-Ensembles (siehe auch SIEBESMA *et al.*, 2003). Zwischen den horizontal schwarz gestrichelten Linien befinden sich die Kumuluswolken. Die Ergebnisse der Simulation mit PALM werden durch rote Linien dargestellt und Initialprofile durch schwarz gepunktete. Die Momente erster Ordnung ((a)-(e)) wurden über die letzte Stunde gemittelt und die Momente höherer Ordnung ((f)-(i)) folgen durch Mittelung über die letzten drei Stunden der Simulation.

Der mittlere Passatwind weht vornehmlich aus östlicher Richtung (Abb. 4.2d und 4.2e) und weist in der zonalen Komponente ein Maximum bei ca. 700 m auf. Darüber nimmt er stetig ab und nähert sich dem vorgegebenen geostrophischen Windprofil an. Die Varianz der Vertikalgeschwindigkeit (Abb. 4.2f) zeigt Maxima in der Mitte der trockenen Grenzschicht und am Oberrand der Wolkenschicht, also im Inversionsbereich. In diesen Bereichen sind die produzierten Fluktuationen der Vertikalgeschwindigkeit am größten. Der vertikale Fluss WT der potentiellen Flüssigwassertemperatur ($WT = \langle \bar{w}''\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 3} \rangle$, Abb. 4.2g) lässt sich mit der Definition von $\bar{\theta}_1$ (siehe Gl. 2.13) als Summe des Flusses der potentiellen Temperatur, welches dem fühlbaren Wärmestrom entspricht, und dem Fluss von \bar{q}_1 interpretieren, wobei für die aufgelösten Anteile $\langle \bar{w}''\bar{\theta}_1'' \rangle = \langle \bar{w}''\bar{\theta}'' \rangle + \frac{L_v}{c_{pT}} \langle \bar{w}''\bar{q}_1'' \rangle$ folgt. In der trockenen Mischungsschicht unterhalb der Wolkenschicht nimmt WT linear mit der Höhe ab. In diesem Bereich ist $\bar{q}_1 = 0$ und WT wird durch das für eine trockene konvektive Grenzschicht typische, lineare Profil des fühlbaren Wärmestroms bestimmt. Für $z > 500$ m dominiert der Anteil vom Fluss des Flüssigwassergehalts, dessen Minimum anzeigt, ab welcher Höhe die Evaporation größer als die Kondensation wird (SIEBESMA *et al.*, 2003). Der vertikale Fluss WQ = $\langle \bar{w}''\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q3} \rangle$ (Abb. 4.2h) nimmt bis zum Beginn der Inversionsschicht bei $z = 1500$ m nur wenig mit der Höhe ab. In der Inversionsschicht folgt eine starke Abnahme mit der Höhe. Abb. 4.2i zeigt die zonale Komponente des vertikalen Impulsflusses $WU = \langle \bar{w}''\bar{u}'' \rangle + \langle \tau_{31} \rangle$. WU ist aufgrund einer negativen mittleren zonalen Geschwindigkeitskomponente positiv, nimmt monoton mit der Höhe ab und ist für $z > 1000$ m nahe Null.

Die in Abb. 4.2 gezeigten Profile der PALM Simulation liegen alle größtenteils innerhalb der Standardabweichung der an der BOMEX Vergleichsstudie teilgenommenen Modelle. Dies zeigt, dass mit PALM die Eigenschaften der Kumulus-bedeckten Grenzschicht in guter Übereinstimmung mit den anderen Studienteilnehmern wiedergegeben werden kann. Lediglich der mittlere Flüssigwassergehalt (Abb. 4.2c) innerhalb der Wolkenschicht liegt außerhalb der Standardabweichung. Diese Größe weist generell eine größere Schwankungsbreite auf als die übrigen Momente erster Ordnung und zeigt sich sensitiv bezüglich Details der Simulation wie der Gitterweite oder des Advektionsverfahrens. Diese Abhängigkeiten werden im folgenden Abschnitt 4.2.2 untersucht.

4.2.2 Sensitivitätsuntersuchungen

Die Large-Eddy Simulation von Kumulus-bedeckten Grenzschichten weist Sensitivitäten bezüglich der verwendeten Gitterweite, des Subskalensmodells oder aber der verwendeten Numerik auf (z.B. MATHEOU *et al.*, 2011; SIEBESMA *et al.*, 2003; STEVENS *et al.*, 2001; BROWN, 1999). Im Folgenden wird daher untersucht, inwiefern sich bei der Simulation mit PALM Abhängigkeiten von der Gitterweite, dem verwendeten Advektionsschema und der horizontalen Modellgebietsgröße ergeben und welche Auswirkungen dies für die Untersuchung der Bilanzgleichungen und der Druck-Korrelationen hat.

Um den Einfluss der Gitterweite auf die BOMEX-Simulation zu untersuchen, wird die Gitterweite der in Abschnitt 4.2.1 vorgestellten Simulation B05 von $\Delta = 5$ m sowohl auf $\Delta = 2.5$ m halbiert (Fall B025) als auch zwei Mal auf $\Delta = 10$ m (Fall B025) und $\Delta = 20$ m (Fall B20) verdoppelt. Die übrigen Simulationseinstellungen bleiben unverändert. Tab. 4.1 gibt eine Übersicht über die Bezeichnung der Fälle und die verwendeten Einstellungen. Es wird jeweils ein isotropes Gitter verwendet, um die Einflussfaktoren auf die Untersuchung zu reduzieren. Die Simulation B025 stellt im Vergleich zu den heutzutage üblicherweise verwendeten isotropen Gitterweiten bei LES-Studien von bewölkten Grenzschichten, die

Fall	Δ (m)	$N_x \times N_y \times N_z$	$L_x \times L_y$ (km×km)	Advektion
B025	2.5	2560 × 2560 × 1280	6.4 × 6.4	WS
B05	5.0	1280 × 1280 × 640	6.4 × 6.4	WS
B10	10.0	640 × 640 × 320	6.4 × 6.4	WS
B20	20.0	320 × 320 × 160	6.4 × 6.4	WS
B10-PW	10.0	640 × 640 × 320	6.4 × 6.4	PW
B10-2Lx	10.0	1280 × 1280 × 320	12.8 × 12.8	WS
B10-4Lx	10.0	2560 × 2560 × 320	25.6 × 25.6	WS

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der im Rahmen der Sensitivitätsuntersuchungen durchgeführten Simulationen. Die Bezeichnung der Fälle geht auf B für BOMEX sowie die verwendete Gitterweite (025 $\hat{=}$ 2.5 m, 05 $\hat{=}$ 5 m usw.) zurück. WS bezeichnet das Advektionsverfahren nach WICKER und SKAMAROCK (2002) und PW das auf PIACSEK und WILLIAMS (1970) basierende Verfahren (vgl. Abschnitt 2.4.2).

bei 10 m-20 m liegen (HEUS, 2012), eine sehr feine Auflösung bereit.

Abb. 4.3 enthält eine exemplarische Auswahl an Vertikalprofilen von Momenten erster und zweiter Ordnung in Abhängigkeit von der Gitterweite. Abgesehen vom Flüssigwassergehalt $\langle \bar{q}_l \rangle$ (Abb. 4.3c) zeigen die Momente erster Ordnung wie $\langle \bar{\theta} \rangle$ (Abb. 4.3a) oder $\langle \bar{u} \rangle$ (Abb. 4.3b) keine Abhängigkeit von der Gitterweite. Dies liegt daran, dass die mittleren Größen wegen der zyklischen Randbedingungen an den lateralen Rändern in der Entwicklung durch die Vorgabe der Initialprofile und bodennahen Flüsse eingeschränkt sind. Dabei werden die mittleren Größen vornehmlich durch großräumigen Antrieb wie z.B. den geostrophischen Wind bestimmt und weniger durch klein-skalige Turbulenz (MATHEOU *et al.*, 2011).

Die Gitterweitenabhängigkeit von $\langle \bar{q}_l \rangle$ äußert sich vor allem im Bedeckungsgrad, dessen Zeitreihe in Abb. 4.4 dargestellt wird. Der Bedeckungsgrad ist der Anteil der vertikalen Säulen, die Flüssigwasser beinhalten. Damit wird er also direkt aus dem \bar{q}_l -Feld abgeleitet. Während der ersten zwei Stunden befinden sich die Simulationen in einer Einschwingphase, die durch plötzliches Einsetzen von Konvektion in ein Überschießen des Bedeckungsgrades mündet (Abb. 4.4). Über die letzten drei Stunden stellt sich eine ungefähr konstante Wolkenbedeckung von ca. 0.16 im Ensemble-Mittel der Vergleichsstudie ein. Die PALM Simulationen liefern alle einen höheren Bedeckungsgrad, der mit steigender Auflösung von ca. 0.21 bei B20 auf ca. 0.26 bei B025 zunimmt, welches einer Zunahme von 24% entspricht. Die große Standardabweichung der LES-Vergleichsstudie zeigt bereits, dass diese Größe auch von den teilnehmenden Modellen nicht übereinstimmend simuliert werden konnte. SIEBESMA *et al.* (2003) diskutieren diesen Sachverhalt und zeigen auf, dass der Bedeckungsgrad davon abhängt, wie groß die oberflächennahen Flüsse sind, ob Absinken verwendet wird, wie fein die Gitterweite ist und welches Subskalenmodell oder Advektionsschema zum Einsatz kommt. Letztlich hat die Wolkenbedeckung bei all diesen Abhängigkeiten aber einen Wert von 0.25 nicht überschritten, sodass in diesem Sinne eine robust niedrige Wolkendecke simuliert werden konnte. Auch MATHEOU *et al.* (2011) zeigen, dass der Bedeckungsgrad bei abnehmender Gitterweite bei Simulationen von

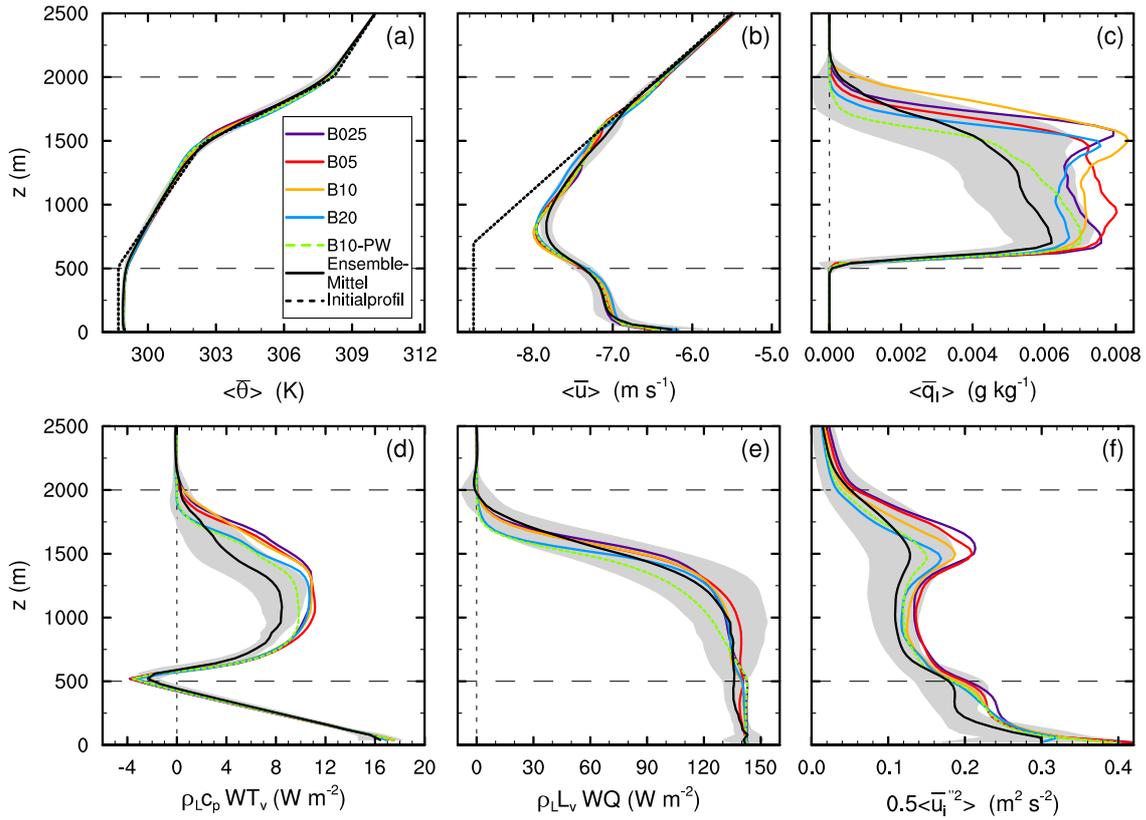


Abbildung 4.3: Vertikalprofile von $\bar{\theta}$ (a), \bar{u} (b), \bar{q}_l (c), dem Auftriebsfluss WT_v (d), WQ (e) und der aufgelösten TKE (f) des BOMEX-Falls mit isotropen Gitterweiten von 2.5 m (violett), 5 m (blau), 10 m (gelb) und 20 m (rot) sowie bei Verwendung des PW-Advektionsverfahrens (grün gestrichelt). Durchgehende, gestrichelte und gepunktete schwarze Linien sowie graue Bereiche werden wie in Abb. 4.2 verwendet. Die zeitliche Mittelung der Momente erster Ordnung (a-c) erfolgt über die letzte Stunde und der Momente zweiter Ordnung (d-f) über die letzten drei Stunden. Die Bezeichnung der Simulationen ist Tab. 4.1 zu entnehmen.

Kumulus-bedeckten Grenzschichten der RICO (Rain in Cumulus over the Ocean)-Studie (RAUBER *et al.*, 2007) zunimmt. Auch wenn der RICO-Fall nicht direkt mit BOMEX vergleichbar ist, so beinhalten doch beide Fälle Kumuluskonvektion in der Passatwindregion und die von MATHEOU *et al.* (2011) simulierte Wolkenbedeckung von 0.25 bei einer Gitterweite von 20 m ist konsistent zu den hier erzielten Resultaten.

Darüber hinaus zeigen MATHEOU *et al.* (2011) anhand von Profilen einiger Momente erster und zweiter Ordnung, dass sich bei RICO-Simulationen ohne Niederschlagsbildung eine Konvergenz der Ergebnisse bei einer Gitterweite von 20 m einstellt. Werden die in MATHEOU *et al.* (2011, Abb. 11) gezeigten Profile mit Abb. 4.3 verglichen, so wird deutlich, dass die Abhängigkeit bei den hier verwendeten Gitterweiten deutlich geringer ausfällt. Zum Beispiel nimmt die TKE (Abb. 4.3f) nur geringfügig mit steigender Gitterweite zu und auch WQ (Abb. 4.3e) und der Auftriebsfluss $WT_v = \langle \bar{w}'\bar{\theta}_v' \rangle + \langle \tau_{v3} \rangle$ zeigen kaum Abhängigkeiten. Daraus lässt sich folgern, dass die hier untersuchten Gitterweiten, welche kleiner oder gleich 20 m sind, bereits alle hinreichend konvergente Ergebnisse liefern.

Basierend auf den soeben vorgestellten Resultaten wird die Untersuchung der Bilan-

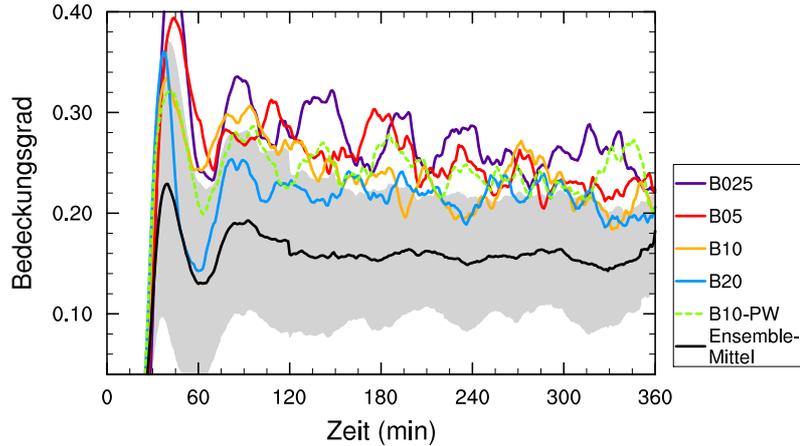


Abbildung 4.4: Zeitliche Entwicklung des Bedeckungsgrades von BOMEX Simulationen mit isotropen Gitterweiten von 20 m (rot), 10 m (gelb), 5 m (blau) und 2.5 m (violett) sowie mit dem PW-Advektionsverfahren (grün gestrichelt). Schwarz durchgehende Linien sowie graue Bereiche werden wie in Abb. 4.2 verwendet. Die Bezeichnung der Simulationen ist Tab. 4.1 zu entnehmen.

zen und Druck-Kovarianzen (Kap. 5 und 6) mit einer Gitterweite von 5 m durchgeführt, auch wenn bereits Simulationen mit größeren Gitterweiten von 10 m und 20 m weitestgehend auflösungsunabhängige, höhere Momente liefern. Damit wird sichergestellt, dass die Residuen der Bilanzen möglichst gering ausfallen. Da die Residuen bei feiner werdender Gitterweite abnehmen, kann mit $\Delta = 5$ m eine gute Schließung der Bilanzen gewährleistet werden. Auch wenn die Simulation B025 mit einer Gitterweite von 2.5 m noch kleinere Residuen liefert, wird sie nicht für die Untersuchung der Bilanzen und Druck-Kovarianzen verwendet, weil sie zu aufwendig ist, um wiederholt zu werden. B025 umfasst ca. $8.3 \cdot 10^9$ Gitterpunkte und benötigte eine CPU-Zeit von ca. 29 Tagen auf 2048 PE der SGI Altix des HLRN.

Zusätzlich zur Gitterweite ergibt sich auch eine leichte Abhängigkeit vom verwendeten Advektionsverfahren. Das standardmäßig verwendete Verfahren fünfter Ordnung nach WICKER und SKAMAROCK (2002), welches mit WS abgekürzt wird (siehe auch Abschnitt 2.4.2), beinhaltet künstlich hinzugefügte numerische Dissipation, die auf den kleinen Skalen wirkt und dort Strukturen dämpft. Bei der Simulation B10-PW, die mit einer isotropen Gitterweite von 10 m durchgeführt wurde, wird das zentrierte Advektionsverfahren zweiter Ordnung nach PIACSEK und WILLIAMS (1970) verwendet, welches die Varianzen der Geschwindigkeiten und Skalare erhält und ohne künstliche Diffusion auskommt. Ein Vergleich der Ergebnisse der Simulationen B10 und B10-PW zeigt, dass $\langle \bar{q}_l \rangle$ bei Verwendung des zentrierten Verfahrens kleiner als bei der Simulation mit dem Verfahren fünfter Ordnung ist (Abb. 4.3). Der Bedeckungsgrad bei B10-PW ist allerdings, gemittelt über die letzten drei Stunden, um ca. 0.02 höher als bei B10 (Abb. 4.4). Der Grund dafür ist, dass beim WS-Verfahren durch die numerische Dissipation Bewegungen im hohen Wellenzahlbereich gedämpft werden. So werden geringe Aufwinde und Feuchtefluktuationen mit kleiner Amplitude gedämpft, die bei der Simulation mit dem PW-Verfahren zu Kondensation und damit Wolkenbildung führen können. Damit ergibt sich also bei Verwendung des zentrierten Verfahrens ein höherer Bedeckungsgrad. Dieses Ergebnis ist in Einklang mit SIEBESMA *et al.* (2003) und MATHEOU *et al.* (2011). Der Einfluss auf die übrigen Momente ist in derselben Größenordnung wie der Einfluss der Gitterweite und damit gering

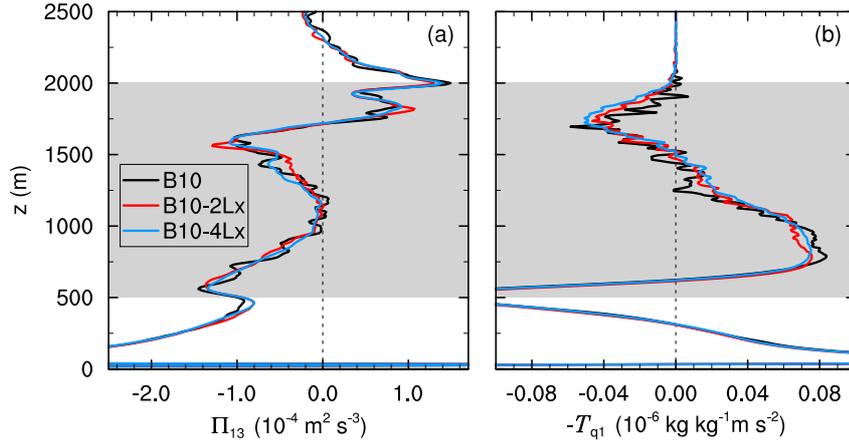


Abbildung 4.5: Vertikalprofile der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{13} (a) und des turbulenten Transports \mathcal{T}_{q1} (b) des Feuchteflusses in zonaler Richtung bei einer horizontalen Modellgebietsgröße von $6.4 \text{ km} \times 6.4 \text{ km}$ (schwarz), $12.8 \text{ km} \times 12.8 \text{ km}$ (rot) sowie $25.6 \text{ km} \times 25.6 \text{ km}$ (blau). Die Gitterweite beträgt 10 m. Der graue Bereich kennzeichnet die Wolkenschicht. Die zeitliche Mittelung erfolgt über die letzten drei Stunden.

(siehe Abb. 4.3). Allerdings wirkt sich die numerische Dissipation des WS-Verfahrens auf die Dissipationsrate der TKE-Bilanz aus, welches in Kap. 5.1 aufgezeigt und diskutiert wird.

SIEBESMA und CUIJPERS (1995) zeigen, dass bei der Simulation von BOMEX eine horizontale Modellgebietsgröße von $5 \text{ km} \times 5 \text{ km}$ ausreichend ist, um die Dynamik von Kumuluswolken zu simulieren, welche repräsentativ für ein weitaus größeres Gebiet als das Modellgebiet ist. Ein Vergleich der Ergebnissen von Simulationen mit doppelter (B10-2Lx) bzw. vierfacher (B10-4Lx) Modellgebietslänge in x- und y-Richtung mit der Ergebnissen von B10 ergibt, dass Zeitreihen sowie Momente erster und zweiter Ordnung keine Abhängigkeit von der Gebietsgröße aufweisen. Lediglich einige Momente dritter Ordnung, wie bspw. die Bilanzterme Π_{13} (Abb. 4.5a) und \mathcal{T}_{q1} (Abb. 4.5b) werden in der Wolkenschicht mit größerem Modellgebiet glatter. Daran wird deutlich, dass zur Bestimmung von Momenten höherer Ordnung generell eine größere Datenbasis notwendig ist, um aussagekräftige Momente zu erhalten (LENSCHOW und STANKOV, 1986). Dies kann bei LES über eine Ausdehnung des zeitlichen Mittelungsintervalls und durch Vergrößerung des Modellgebiets erzielt werden, wobei durch letzteres eine erhöhte Zahl von turbulenten Wirbeln im Modellgebiet auftreten kann, welches die Standardabweichung der Momente reduziert (z.B. CHLOND und WOLKAU, 2000). Im gegenwärtigen Fall liefert eine Gebietsgröße von $6.4 \text{ km} \times 6.4 \text{ km}$ und eine zeitliche Mittelung über drei Stunden bei den meisten Momenten auch innerhalb der Wolkenschicht glatte Profile. Trotz der starken lokalen Schwankungen einiger Momente dritter Ordnung liefern die Profile belastbare Aussagen über den Verlauf der Momente, wie Abb. 4.5 verdeutlicht. Daher wird diese Kombination ($L_x = L_y = 6.4 \text{ km}$, Mittelung über drei Stunden) für die Analyse der Bilanzen und Druck-Kovarianzen verwendet.

4.3 DYCOMS – Stratokumulus-bedeckte Grenzschicht

Im Feldexperiment *Second Dynamics and Chemistry of Marine Stratocumulus* (DYCOMS-II, STEVENS *et al.*, 2003) wurden Stratokumulus-bedeckte Grenzschichten über

dem nordöstlichen Pazifik vor der Küste Kaliforniens untersucht. Ergebnisse des ersten in diesem Experiment getätigten Forschungsfluges dienten als Grundlage einer LES-Vergleichsstudie (STEVENS *et al.*, 2005). Das Setup dieser Studie wird in der vorliegenden Arbeit verwendet und nachfolgend mit DYCOMS abgekürzt. Während des Experiments konnte über dem Meer eine besonders homogene und lang anhaltende Stratokumulus-Schicht beobachtet werden, die kaum durch Niederschlag modifiziert wurde. Die Beobachtungen fanden nachts statt, sodass die Wolkenschicht nicht durch solare Strahlung beeinflusst wurde (STEVENS *et al.*, 2003). Damit werden die für diese Arbeit aufgestellten Kriterien bezüglich der Simulation möglichst einfacher und gleichzeitig realistischer Fälle erfüllt.

4.3.1 Setup und Modellvergleich

Das Setup für die Simulation der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht basiert auf der in STEVENS *et al.* (2005) beschriebenen LES-Modellvergleichsstudie. Abgesehen von der Gitterweite und der horizontalen Modellgebietsgröße werden die in STEVENS *et al.* (2005) beschriebenen Vorgaben umgesetzt. Es wird wie bei der Simulation von BOMEX eine isotrope Gitterweite von $\Delta = 5$ m und ein horizontales Modellgebiet von $6.4 \text{ km} \times 6.4 \text{ km}$ verwendet. Die Gebietsgröße in vertikaler Richtung beträgt 1600 m. Damit wird das in der LES-Modellvergleichsstudie verwendete anisotrope Gitter mit $\Delta x = \Delta y = 35$ m und $\Delta z = 5$ m in horizontaler Richtung verfeinert. Die bei STEVENS *et al.* (2005) vorgegebene horizontale Modellgebietsgröße von $3.36 \text{ km} \times 3.36 \text{ km}$ wird in dieser Arbeit vergrößert, da sich heraus gestellt hat, dass vor allem die Impulsflüsse eine größere Datengrundlage erfordern, um statistisch aussagekräftig zu sein, wie bereits LENSCHOW und STANKOV (1986) ausführen. Die Simulationszeit beträgt 4 h, wobei ein mittlerer Zeitschritt von 0.93 s verwendet wird. Im Folgenden wird die Simulation mit D05 bezeichnet.

Der Grundzustand der Grenzschicht wird aus Messungen abgeleitet und idealisiert mit zwei Schichten dargestellt. In der unteren Schicht, die bis in eine Höhe von 840 m reicht, werden konstante Initialprofile $\bar{\theta}_1 = 289 \text{ K}$ und $\bar{q} = 9 \text{ g kg}^{-1}$ vorgegeben. Für $z > 840$ m nimmt das Initialprofil von $\bar{\theta}_1$ gemäß $\bar{\theta}_1 = (297.5 + (z - 840)^{1/3}) \text{ K}$ zu (Abb. 4.7a) und für den Gesamtwassergehalt wird $\bar{q} = 1.5 \text{ g kg}^{-1}$ gesetzt, welches einen großen Sprung im initialen Feuchteprofil vorgibt (Abb. 4.7b). Außerdem wird eine Wolkenschicht initial zwischen 600 m und 800 m vorgegeben, welche bei 800 m einen Wert von $\bar{q}_l = 0.45 \text{ g kg}^{-1}$ aufweist (Abb. 4.7c). Angetrieben wird die Grenzschicht von einem konstanten geostrophischen Wind ($u_g = 7 \text{ m s}^{-1}$ und $v_g = -5.5 \text{ m s}^{-1}$).

Weiterer Antrieb erfolgt durch Vorgabe von konstanten, oberflächennahen kinematischen Flüssen $H_{\theta 0} = 1.21 \cdot 10^{-2} \text{ K m s}^{-1}$ und $H_{q 0} = 3.82 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$, welches einem fühlbaren Wärmefluss von 15 W m^{-2} bzw. einem latenten Wärmefluss von 115 W m^{-2} entspricht. Die oberflächennahen Impulsflüsse werden über (2.56) und (2.57) mit einer Schubspannungsgeschwindigkeit $u_* = 0.25 \text{ m s}^{-1}$ bestimmt. Zu Beginn der Simulation wird Turbulenz über das Aufprägen von Zufallsstörungen auf die horizontalen Geschwindigkeitsfelder angeregt. Die Dämpfung von Schwerewellen, die in der stabilen Schicht angeregt werden, wird durch eine Rayleigh-Dämpfung ab einer Höhe von 1300 m sichergestellt.

Die Divergenz D des großräumigen Windfeldes wird zu $D = 3.75 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ bestimmt, welches konsistent zum beobachteten Temperaturprofil oberhalb der Grenzschicht und dem zur Bildung von Stratokumulus benötigten Strahlungsantrieb ist (STEVENS *et al.*, 2005). D fließt in das Profil der Absinkgeschwindigkeit w_s ein, welche sich gemäß $w_s = -Dz$ linear mit der Höhe ändert.

Der Antrieb der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht über langwellige Strahlungs-

abkühlung am Wolkenoberrand wird über eine Parametrisierung berücksichtigt, die auf Basis von Rechnungen mit einem Strahlungstransfermodell für DYCOMS aufgestellt wurde (STEVENS *et al.*, 2005). Die in den ersten Hauptsatz (2.20) eingehende Tendenz \overline{Q}_θ aufgrund von langwelliger Strahlung, die auch als *Heizrate* bezeichnet wird, lautet

$$\overline{Q}_\theta = -\frac{1}{\rho_0 c_p} \frac{\partial}{\partial z} F_{\text{rad}}, \quad (4.2)$$

wobei F_{rad} für den langwelligen Netto-Strahlungsfluss steht. In F_{rad} gehen sowohl der Flüssigwassergehalt \overline{q}_1 über das Mischungsverhältnis

$$\overline{r}_1 = \frac{\overline{q}_1}{1 - \overline{q}_1} \quad (4.3)$$

als auch die lokale Grenzschichthöhe $z_{i,\text{loc}}$ ein. $z_{i,\text{loc}}$ wird als lokale Position der 8.0 g kg^{-1} -Isofläche des Gesamtwassergehalts \overline{q} bestimmt und ist damit die unterste Höhe einer Modellsäule, bei der $\overline{q} = 8.0 \text{ g kg}^{-1}$ ist. Damit lautet die Parametrisierung für den Netto-Strahlungsfluss

$$F_{\text{rad}}(x, y, z, t) = F_0 e^{-Q(z, \infty)} + F_1 e^{-Q(0, z)} + \alpha_z \rho_i c_p D H(z - z_{i,\text{loc}}) \left[\frac{1}{4} (z - z_{i,\text{loc}})^{4/3} + z_{i,\text{loc}} (z - z_{i,\text{loc}})^{1/3} \right], \quad (4.4)$$

in die der dimensionslose Flüssigwasserpfad

$$Q(z_1, z_2) = \tilde{\kappa} \int_{z_1}^{z_2} dz \rho_i \overline{r}_1 \quad (4.5)$$

und die Heavyside-Funktion (Stufenfunktion)

$$H(z - z_{i,\text{loc}}) = \begin{cases} 0 & \text{für } z < z_{i,\text{loc}} \\ 1 & \text{für } z \geq z_{i,\text{loc}} \end{cases} \quad (4.6)$$

einfließen. Die Terme auf der rechten Seite von (4.4) beschreiben von links nach rechts Abkühlung am Oberrand der Wolken, leichte Erwärmung an der Wolkenbasis und eine Abkühlung in der freien Troposphäre direkt oberhalb der Wolkenbasis. Über Vergleiche mit einem Strahlungstransfermodell sind die Konstanten, die in (4.4) eingehen, zu $\tilde{\kappa} = 85 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$, $\alpha_z = 1 \text{ K m}^{-1/3}$, $F_0 = 70 \text{ W m}^{-2}$, $F_1 = 22 \text{ W m}^{-2}$ und $\rho_i = 1.13 \text{ kg m}^{-3}$ (die Dichte genau unterhalb der Wolkenobergrenze) bestimmt worden (STEVENS *et al.*, 2005).

In den Simulationen wird eine geographische Breite von $\varphi = 31.5^\circ$ verwendet, welches der Breite entspricht, bei der das Feldexperiment stattgefunden hat.

Die statistischen Momente von DYCOMS werden als Mittel über die letzten beiden Simulationsstunden bestimmt, wobei alle 20 s Profile in das Mittel einfließen.

Ein Vergleich mit Ergebnissen von anderen LES-Modellen, die an der Studie teilgenommen haben³, erfolgt in derselben Darstellungsweise wie bei STEVENS *et al.* (2005). Insgesamt nahmen an dem Modellvergleich 10 verschiedene Forschergruppen teil, wobei in den DYCOMS-Datensatz 16 unterschiedliche Simulationen einfließen. Dieser Datensatz

³Die Daten der Vergleichsstudie befinden sich unter

http://gcss-dime.giss.nasa.gov/dycoms-ii/modsim_dycoms-ii_gcss7-rf01.html

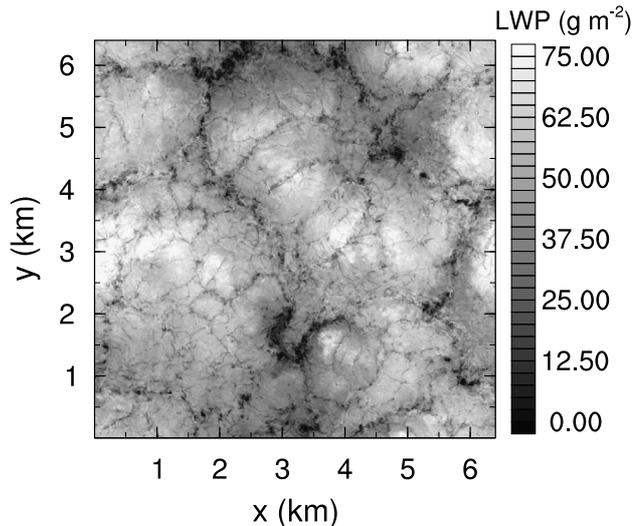


Abbildung 4.6: Isoflächendarstellung des Flüssigwasserpfades (LWP) der DYCOMS Simulation zum Zeitpunkt $t = 4$ h.

wird auch als Master-Ensemble bezeichnet und in den Abbildungen als durchgehende Linie gekennzeichnet. Darüber hinaus enthalten die Abbildungen Informationen über Maximum und Minimum sowie obere und untere Quartile des Master-Ensembles. Dabei bezeichnet das untere (obere) Quartil einer Verteilung, den Wert, der zu 25 % unterschritten (überschritten) wird (siehe auch SCHÖNWIESE, 2006, S. 41). Innerhalb des unteren und oberen Quartils befinden sich also 50 % der Ensemble-Mitglieder.

Eine Momentaufnahme des Flüssigwasserpfades (Abb. 4.6) verdeutlicht, dass das gesamte Modellgebiet mit Wolken bedeckt ist und sich die für Stratokumulus typischen Zellenstrukturen ausbilden.

Die mit PALM simulierte Grenzschicht ist gut durchmischt und wird mit einer starken Inversion bei $z = 850$ m abgeschlossen, welches an markanten Temperatur- und Feuchtesprüngen von ca. 10 K bzw. 7.5 g kg^{-1} am Oberrand der Grenzschicht deutlich wird (Abb. 4.7a u. 4.7b). Zwischen 600 m und 850 m bildet sich eine Wolkenschicht aus (Abb. 4.7c). Der mittlere Grenzschichtwind weht aus nord-westlicher Richtung und geht am Oberrand der Grenzschicht sprunghaft in den geostrophischen Wind über (Abb. 4.7d u. 4.7e).

Turbulenz wird in der Grenzschicht vor allem durch langwellige Strahlungsabkühlung am Wolkenoberrand erzeugt (Abb. 4.7f u. 4.9d). Die Abkühlung bewirkt eine Labilisierung, die zu Durchmischung und Konvektion führt. Weiterer Antrieb wird durch leichtes Heizen am unteren Rand der Grenzschicht hervorgerufen. Der lineare Verlauf des Auftriebsflusses (Abb. 4.7h) unterhalb der Wolkenschicht zeigt an, dass sich ein quasi-stationärer Zustand eingestellt hat. Innerhalb der Wolkenschicht weist $\langle \bar{w}'\bar{\theta}_v'' \rangle$ ein Maximum auf, weil Auftrieb durch die Abkühlung am Wolkenoberrand hervorgerufen wird. Das Minimum am Grenzschichtoberrand ist auf Entrainment von wärmerer Luft aus dem Inversionsbereich zurückzuführen. Die gute Durchmischung in der gesamten Grenzschicht führt dazu, dass die Varianz der Vertikalgeschwindigkeit ein Maximum im Bereich der unteren Wolkenschicht aufweist (Abb. 4.7g). Der Impulsfluss nimmt nahezu linear mit der Höhe ab (Abb. 4.7i), welches auch ein Indikator für gute Durchmischung ist.

Nachdem die Einschwingphase vorüber ist, ändert sich die Dicke der Wolkenschicht von ca. 250 m mit der Zeit kaum, wie die Zeitreihen der Grenzschichthöhe z_i und der Höhe z_b der Wolkenbasis in Abb. 4.8 zeigen. Dabei wird z_i aus $z_{i,loc}$ als mittlere Position der 8.0 g kg^{-1} -Isolfläche des Gesamtwassergehalts bestimmt. z_b stellt die mittlere Höhe dar, in welcher der Flüssigwassergehalt zum ersten Mal ungleich Null ist.

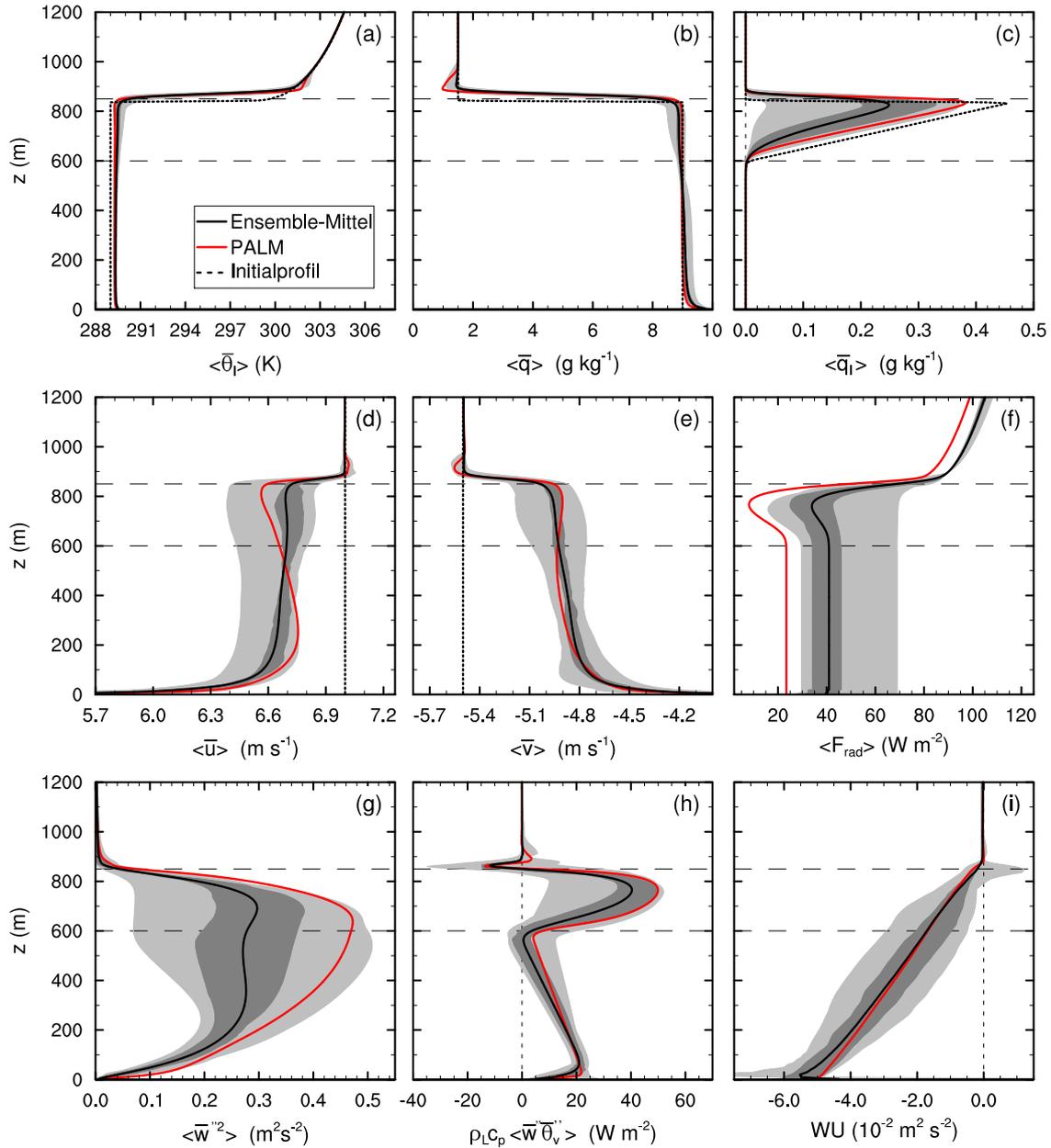


Abbildung 4.7: Vertikalprofile der potentiellen Flüssigwassertemperatur $\bar{\theta}_l$ (a), des Gesamtwassergehalts \bar{q} (b), des Flüssigwassergehalts \bar{q}_l (c), der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten \bar{u} (d) und \bar{v} (e), des Netto-Strahlungsflusses F_{rad} (f), der aufgelösten Varianz der Vertikalgeschwindigkeit \bar{w}'^2 (g), des aufgelösten vertikalen Auftriebsflusses $\bar{w}'\bar{\theta}'_v$ (h) und des totalen vertikalen Impulsflusses WU (i) für den DYCOMS-Fall. Schwarze Linien kennzeichnen das Ensemble-Mittel der Vergleichsstudie. Der hellgrau unterlegte Bereich zeigt den gesamten Bereich des Master-Ensembles an und der dunkelgrau unterlegte Bereich stellt den halben Quartilsabstand dar (siehe auch STEVENS *et al.*, 2005). Zwischen den horizontal schwarz gestrichelten Linien befindet sich die Stratokumulus Bewölkung. Die Ergebnisse der Simulation mit PALM werden durch rote Linien dargestellt und die Initialprofile durch schwarz gepunktete. Alle Momente sind über die letzten zwei Stunden der Simulation gemittelt.

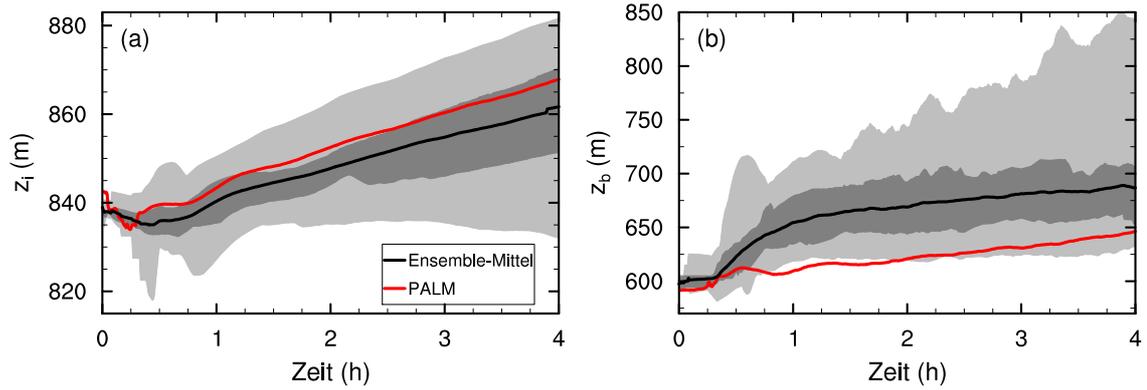


Abbildung 4.8: Zeitreihen der Grenzschichthöhe z_i (a) und der Höhe der Wolkenbasis z_b (b) für DYCOMS. Schwarze und rote Linien sowie hellgrau und dunkelgrau unterlegte Bereiche werden wie in Abb. 4.7 verwendet.

Im Ensemble-Mittel der LES-Studie wird eine eher entkoppelte Grenzschicht simuliert. Dabei versteht man unter Entkopplung, dass sich Mischungsschicht und darüber liegende Wolken-schicht dynamisch voneinander abkoppeln und zwei Schichten bilden (wie es bei BOMEX der Fall ist). Dies ist z.B. an einer leichten Neigung im mittleren Feuchteprofil (Abb. 4.7b), einem Minimum von $\langle \overline{w'^2} \rangle$ an der Wolkenbasis (Abb. 4.7g) oder einem negativen Auftriebsfluss an der Wolkenbasis (Abb. 4.7h) zu erkennen (STEVENS *et al.*, 2005). Entkopplung tritt vor allem dann auf, wenn der Strahlungsantrieb im Vergleich zum Antrieb durch den oberflächennahen Feuchtefluss klein ist (z.B. BRETHERTON und WYANT, 1997). Verglichen mit dem Ensemble-Mittel wird mit PALM eine Wolken-schicht mit hohem Flüssigwasseranteil (Abb. 4.7c) und eine leicht kühlere (Abb. 4.7a) und vor allem gut durchmischte, also mit der Mischungsschicht gekoppelte, Grenzschicht simuliert.

Die PALM-Simulation hält die Dicke der Wolken-schicht aufrecht und liefert eine homogene Wolkenbedeckung von nahezu 100 % (Abb. 4.10d), welches mit den Beobachtungen während des Experiments übereinstimmt (siehe STEVENS *et al.*, 2005, Abb. 3). Einige Mitglieder des Ensembles simulieren allerdings eine durchbrochene Wolkendecke, welches sich in einer starken Streuung der LES-Ergebnisse äußert.

Abgesehen vom Profil des Netto-Strahlungsflusses (Abb. 4.7f) liegen die Ergebnisse der Simulation mit PALM innerhalb der Ergebnisse, die mit den an der Vergleichsstudie teilnehmenden Modellen erzielt wurden. F_{rad} ist im Vergleich zum Ensemble-Mittel nach links verschoben, welches auf den mit PALM simulierten hohen Flüssigwassergehalt zurückgeht, welcher als einzige variable Größe in die Berechnung von F_{rad} einfließt (siehe Gl. 4.4). F_{rad} geht als Divergenz in den ersten Hauptsatz ein, sodass die daraus resultierende Abkühlungsrate am Wolkenoberrand größer als im Ensemble-Mittel ist (vergleiche Abb. 4.9d). Eine höhere Abkühlungsrate führt zu stärkerer Konvektion und trägt dazu bei, dass mit PALM eine gut durchmischte, gekoppelte Grenzschicht mit einer geschlossenen Wolkendecke simuliert werden kann. Abschließend bleibt festzuhalten, dass es mit PALM möglich ist, den DYCOMS-Fall in guter Übereinstimmung mit den Beobachtungen während des Experiments und den meisten Modellen der Vergleichsstudie zu simulieren.

4.3.2 Sensitivitätsuntersuchungen

Die Ergebnisse der DYCOMS Simulationen zeigen ebenso wie die BOMEX Simulationen Sensitivitäten zum Beispiel bezüglich der verwendeten Numerik oder des Subskalenmodells

Fall	Δ (m)	$N_x \times N_y \times N_z$	Advektion
D025	2.5	2560 \times 2560 \times 640	WS
D05	5.0	1280 \times 1280 \times 320	WS
D10	10.0	640 \times 640 \times 160	WS
D20	20.0	320 \times 320 \times 80	WS
D10-PW	10.0	640 \times 640 \times 320	PW
D10-BC	10.0	640 \times 640 \times 320	BC/WS

Tabelle 4.2: Zusammenfassung der im Rahmen der Sensitivitätsuntersuchungen durchgeführten Simulationen. Die Bezeichnung der Fälle geht auf D für DYCOMS sowie die verwendete Gitterweite (025 $\hat{=}$ 2.5 m, 05 $\hat{=}$ 5 m usw.) zurück. WS bezeichnet das Advektionsverfahren nach WICKER und SKAMAROCK (2002), PW das auf PIACSEK und WILLIAMS (1970) basierende Verfahren und BC das für Skalare verwendete monotone Schema nach CHLOND (1994) (vgl. Abschnitt 2.4.2).

(z.B. STEVENS *et al.*, 2005; KIRKPATRICK *et al.*, 2006; KUROWSKI *et al.*, 2009). Inwiefern sich die Wahl der Gitterweite, des Advektionsschemas und der horizontalen Modellgebietsgröße auf die mit PALM erzielten Simulationsergebnisse auswirkt, wird nachfolgend aufgezeigt.

Der Einfluss der Gitterweite auf Momente erster und zweiter Ordnung wird anhand eines Vergleichs von Ergebnissen der soeben vorgestellten Simulation D05 mit einer Gitterweite von 5 m und drei weiteren Simulationen mit isotropen Gitterweiten von 2.5 m (D025), 10 m (D10) und 20 m (D20) untersucht. Bezeichnungen und Simulationsdetails sind Tab. 4.2 zu entnehmen.

Der Flüssigwassergehalt $\langle \bar{q}_l \rangle$ (Abb. 4.9b) nimmt mit abnehmender Gitterweite zu. Dies wirkt sich direkt auf die Abkühlungsrate $\langle \bar{Q}_\theta \rangle$ (Abb. 4.9d) am Wolkenoberrand aus. Je feiner die Gitterweite, desto höher ist der Strahlungsantrieb und desto stärker ist die am Wolkenoberrand generierte Turbulenz und das Durchmischen der Grenzschicht. Dies zeigt sich bspw. an der Zunahme der Varianz der Vertikalgeschwindigkeit (Abb. 4.9e) mit abnehmender Gitterweite. Die mittlere Höhe z_b der Wolkenbasis (Abb. 4.10b) liegt bei der Simulation D20 bei ca. 670 m und nimmt um ca. 40 m auf 630 m bei D025 ab. Die Grenzschichthöhe z_i , die auch die Höhe der Wolkenschicht angibt, erniedrigt sich von D20 zu D025 um ca. 5 m, sodass effektiv die Dicke der Wolkenschicht mit abnehmender Gitterweite zunimmt. Der Flüssigwasserpfad LWP (Abb. 4.10c) zeigt durch seine direkte Abhängigkeit von \bar{q}_l auch eine Zunahme bei abnehmender Gitterweite. Diese Ergebnisse sind in Einklang mit einer Gitterweitenstudie des DYCOMS-Fall von KUROWSKI *et al.* (2009). Sie zeigen, dass der Flüssigwasserpfad LWP und die TKE mit steigender Auflösung zunehmen.

Die Profile der zonalen Geschwindigkeitskomponente (Abb. 4.9c), des Gesamtwassergehalts (Abb. 4.9a) und des latenten Wärmeflusses (Abb. 4.9f) zeigen exemplarisch, dass die Abhängigkeit anderer Momente von der Gitterweite gering ist. Abgesehen von der Simulation D20 liefern alle hier diskutierten Simulationen eine geschlossene Wolkendecke (Abb. 4.10d) und eine gut durchmischte, gekoppelte Grenzschicht. Die Ergebnisse lie-

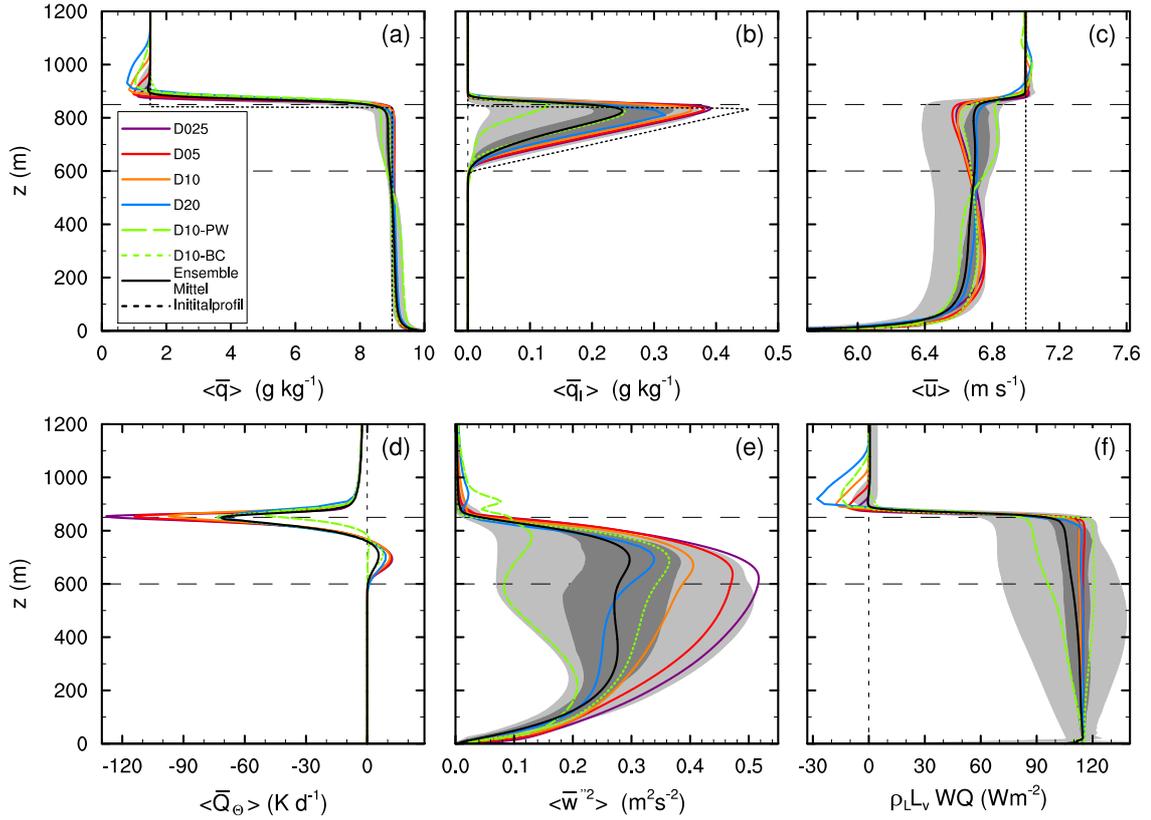


Abbildung 4.9: Vertikalprofile des Gesamtwassergehalts \bar{q} (a), des Flüssigwassergehalts \bar{q}_l (b), der zonalen Geschwindigkeitskomponente \bar{u} (c), der Heizrate \bar{Q}_θ (d) (für \bar{Q}_θ sind keine Informationen über die Quartile sowie Maximum und Minimum des Ensembles verfügbar), der aufgelösten Varianz \bar{w}'^2 (e) und des totalen vertikalen Flusses WQ (f) für den DYCOMS-Fall mit isotropen Gitterweiten von 2.5 m (violett), 5 m (blau), 10 m (gelb) und 20 m (rot) sowie bei Verwendung des PW-Advektionsverfahrens (grün gestrichelt) und des BC-Advektionsverfahrens (grün gepunktet). Schwarze Linien sowie hellgrau und dunkelgrau unterlegte Bereiche werden wie in Abb. 4.7 verwendet. Alle Momente sind über die letzten zwei Stunden der Simulation gemittelt. Die Bezeichnung der Simulationen ist Tab. 4.2 zu entnehmen.

gen alle im Bereich des Ensembles der Vergleichsstudie. Die Profile und Zeitreihen lassen außerdem eine Konvergenz in Richtung der kleinsten Gitterweite erkennen. Aus Rechenzeit ökonomischen Gründen wird für die Analyse der Bilanzen (Kap. 5) und der Druck-Kovarianzen (Kap. 6) die Simulation D05 mit einer Gitterweite von 5 m herangezogen. Die Simulation D025, in der ca. $4.2 \cdot 10^9$ Gitterpunkte verwendet werden, benötigte eine CPU-Zeit von ca. 22 Tagen auf 2048 PE der SGI Altix des HLRN und kann daher nicht ohne Weiteres wiederholt werden. Die Verwendung von $\Delta = 5$ m stellt daher einen Kompromiss zwischen möglichst hoher Auflösung und tragbaren Simulationskosten dar und auch D05 liefert aufgrund der Konvergenz der Ergebnisse Resultate, die kaum von der Gitterweite abhängen.

Der Einfluss der Numerik auf die Simulationsergebnisse wird durch die Verwendung verschiedener Advektionsverfahren abgeschätzt. Die Ergebnisse der Simulation D10, in der das Standardverfahren nach WICKER und SKAMAROCK (2002) benutzt wird, werden mit Simulationsergebnissen von D10-PW und D10-BC (siehe Tab. 4.2) verglichen.

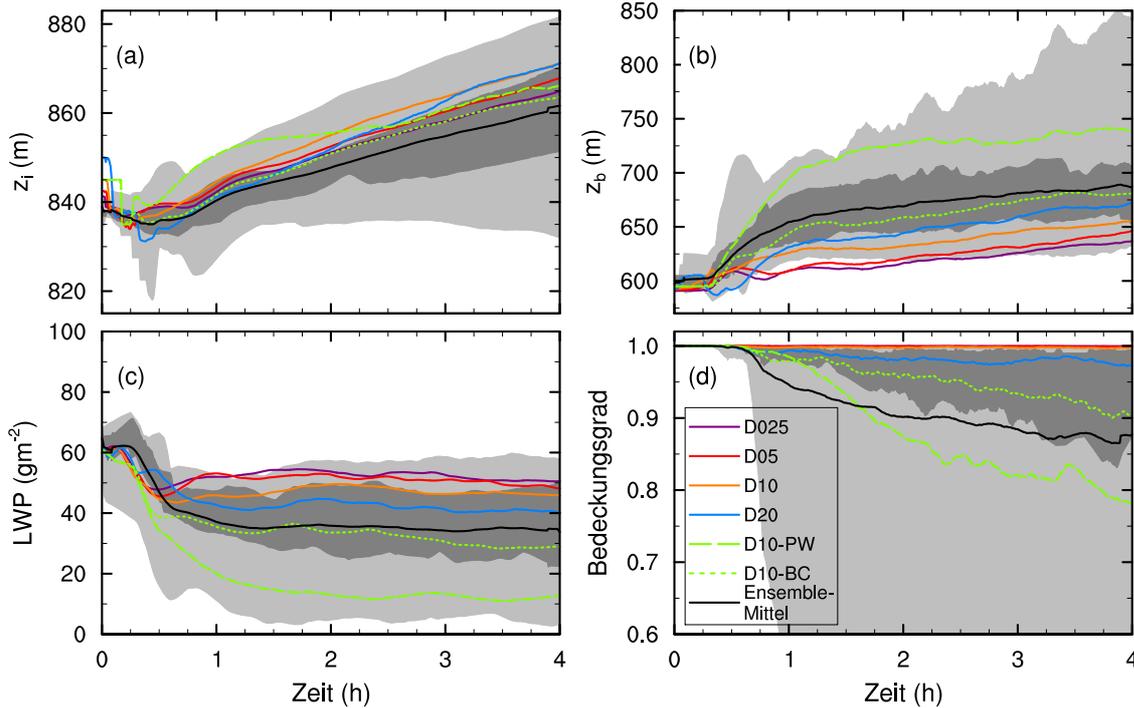


Abbildung 4.10: Zeitreihen der Grenzschichthöhe z_i (a), der Höhe der Wolkenbasis z_b (b), des räumlich gemittelten Flüssigwasserpfad LWP (c) und des Bedeckungsgrades (d) von DYCOMS Simulationen mit isotropen Gitterweiten von 2.5 m (violett), 5 m (blau), 10 m (gelb) und 20 m (rot) sowie bei Verwendung des PW-Advektionsverfahrens (grün gestrichelt) und des BC-Advektionsverfahrens (grün punktiert). Schwarze Linien sowie hellgrau und dunkelgrau unterlegte Bereiche werden wie in Abb. 4.7 verwendet. Die Bezeichnung der Simulationen ist Tab. 4.2 zu entnehmen.

In D10-PW wird für alle prognostischen Größen das zentrierte Advektionsverfahren nach PIACSEK und WILLIAMS (1970) verwendet. Bei D10-BC kommt für die Skalaradvektion das auf CHLOND (1994) basierende, monotone (BC-) Verfahren zum Einsatz und für die Geschwindigkeitskomponenten wird das WS-Verfahren verwendet.

Wie bereits bei den Sensitivitätsuntersuchungen der BOMEX-Simulation beobachtet werden konnte (Abschnitt 4.2.2), ergibt sich bei D10-PW weniger Flüssigwasser (Abb. 4.9b) als bei D10. Im Gegensatz zu BOMEX führt dies bei DYCOMS allerdings zu einem geringeren Bedeckungsgrad (Abb. 4.10d). Der Bedeckungsgrad nimmt bei D10-PW von der ersten bis zur vierten Stunde von 0.97 auf 0.78 ab und zeigt an, dass sich eine durchbrochene Wolkendecke einstellt, deren Basis deutlich höher liegt (Abb. 4.10b) und deren Mächtigkeit niedriger als bei Simulationen mit dem WS-Verfahren ist. Der Grund dafür liegt im geringeren Strahlungsantrieb (Abb. 4.9d), der sich aufgrund des geringeren Flüssigwassers einstellt. Weniger Strahlungsantrieb führt zur Entkopplung der Grenzschicht, welches sich z.B. am Minimum der Varianz der Vertikalgeschwindigkeit an der Wolkenbasis (Abb. 4.9e) oder der Neigung des Profils des Gesamtwassergehalts (Abb. 4.9a) und des latenten Wärmeflusses (Abb. 4.9f) zeigt.

Wird für die Skalare das monotone BC-Verfahren verwendet, verschwindet das bei Benutzung des WS- und PW-Verfahrens zu beobachtende Überschießen einiger Profile im Inversionsbereich (siehe Abb. 4.9a u. 4.9f). Das Überschießen ist auf Phasenfehler im Advektionsverfahren zurückzuführen, die sich an starken Gradienten ausbilden (STEVENS *et al.*,

2005) und tritt beim monotonen Verfahren (siehe auch Abschnitt 2.4.2) nicht auf. Der Vergleich der Ergebnisse von D10 und D10-BC zeigt außerdem, dass mit dem BC-Verfahren weniger Flüssigwasser (Abb. 4.9b) simuliert wird, welches über die Kopplung mit der langwelligeren Ausstrahlung zu weniger Turbulenz in der Grenzschicht (Abb. 4.9e) und einem Aufbrechen der geschlossenen Wolkendecke (Abb. 4.10d) führt. Dies kommt dem Ensemble-Mittel der Vergleichsstudie sehr nah, wie die diskutierten Profile und Zeitreihen zeigen. Allerdings benötigt D10-BC ca. 30 % mehr Rechenzeit im Vergleich zu D10, weil das BC-Verfahren an sich aufwendiger ist und nicht in einer auf Rechenzeit optimierten Form vorliegt.

Ein Vergleich der mit den drei Advektionsverfahren ermittelten Ergebnisse, zeigt, dass die Simulation mit dem WS-Verfahren eine Grenzschicht liefert, die abgesehen vom numerisch bedingten Überschießen am Wolkenoberrand am meisten mit den während des DYCOMS Experiments beobachteten Eigenschaften einer bedeckten, gekoppelten Grenzschicht übereinstimmt. Daher wird auch für die Analyse der Bilanzen und Druck-Kovarianzen eine Simulation (D05) verwendet, in der das WS-Verfahren benutzt wird.

Aus Ergebnissen von Simulationen mit verdoppelten und vervierfachen horizontalen Modellgebietslängen L_x und L_y im Vergleich zur Simulation D10 (nicht gezeigt), lässt sich abgesehen von den Bilanztermen des horizontalen Impulsflusses $UV = \langle \overline{u''v''} \rangle + \langle \tau_{12} \rangle$ keine Abhängigkeiten von der horizontalen Modellgebietsgröße ableiten. Dies zeigt, dass in den meisten Fällen eine horizontale Gebietsgröße von $6.4 \text{ km} \times 6.4 \text{ km}$ und eine zeitliche Mittelung über zwei Stunden eine ausreichende Statistik liefern, um glatte Momente höherer Ordnung hervorzubringen.

5 Bilanzen der Momente zweiter Ordnung

Bilanzen von statistischen Momenten höherer Ordnung sind die Grundlage für Turbulenzmodelle. Eine Weiterentwicklung der Modelle im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung kann daher nur bei gründlicher Kenntnis der Bilanzen der Momente zweiter Ordnung erfolgen. Die Bilanzen sind aufgrund der Dreidimensionalität von Turbulenz miteinander gekoppelt. Deshalb werden nachfolgend nicht nur Bilanzen von Varianzen und vertikalen Flüssen, sondern auch Bilanzen der horizontalen Flüsse diskutiert, um eine vollständige Untersuchung von Bilanzen wesentlicher Momente zweiter Ordnung bereit zu stellen. Daraus ergeben sich insgesamt sechzehn verschiedene Bilanzen, die sowohl für die Kumulus- als auch für die Stratokumulus-bedeckte Grenzschicht diskutiert und miteinander verglichen werden. In diesem Kapitel wird die dieser Arbeit zugrundeliegende, zentrale Fragestellung nach dem Verhalten der Bilanzen bei bewölkten Grenzschichten beantwortet.

Aufbauend auf einem Vergleich einiger Bilanzen der trockenen konvektiven Grenzschicht mit der Literatur in Kapitel 5.1, folgt in den Kapiteln 5.2 bis 5.6 die Vorstellung und Diskussion von Bilanzen der TKE, der Geschwindigkeitsvarianzen, der Impuls-, Temperatur- und Feuchteflüsse, der skalaren Varianzen und der Kovarianz aus Temperatur und Feuchte. Dafür werden Ergebnisse der Simulationen B05 und D05 verwendet. Die sich daraus ergebenden Schlussfolgerungen für die Turbulenzmodellierung im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung werden in Kapitel 5.7 aufgezeigt.

5.1 Validierung der Bilanzenbestimmung anhand der trockenen konvektiven Grenzschicht

Um die Umsetzung der in Kap. 3.1 beschriebenen Methode zur Bestimmung von Bilanztermen der Momente zweiter Ordnung zu überprüfen, wird die Simulation FC der trockenen konvektiven Grenzschicht (siehe Kap. 4.1) herangezogen. Zunächst folgt in Abschnitt 5.1.1 ein Vergleich von Bilanzen der TKE, der Temperaturvarianz und des vertikalen Temperaturflusses mit den bei MIRONOV *et al.* (2000) bestimmten Bilanzen. Die Schließung der TKE-Bilanz wird einer gesonderten Betrachtung unterzogen, die dann in Abschnitt 5.1.2 vorgenommen wird.

5.1.1 Vergleich mit Mironov *et al.* (2000)

Die Bilanzterme der TKE von Simulation FC sind in Abb. 5.1 den in MIRONOV *et al.* (2000) dargestellten Termen gegenübergestellt. Ein Vergleich zeigt, dass die Terme abgesehen von der Dissipationsrate \mathcal{D}_{TKE} sowohl vom Verlauf als auch von der Größenordnung her sehr gut mit MIRONOV *et al.* (2000) übereinstimmen. Es lässt sich allerdings ein leichter Versatz am Grenzschichtoberrand erkennen. So befinden sich die Extrema von \mathcal{B}_{TKE} , $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ und $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^p$ am Grenzschichtoberrand bei MIRONOV *et al.* (2000) (Abb. 5.1a) exakt bei $z = h$, wobei h die Grenzschichthöhe z_i bezeichnet, die aus dem Minimum des Temperaturflusses bestimmt wird (siehe auch Abschnitt 4.1). Bei der Simulation FC (Abb. 5.1b) treten sie hingegen unterhalb von $z = h$ auf. Dieser Versatz geht auf die unterschiedliche Reihenfolge von Normierung und zeitlicher Mittelung zurück. Bei MIRONOV *et al.*

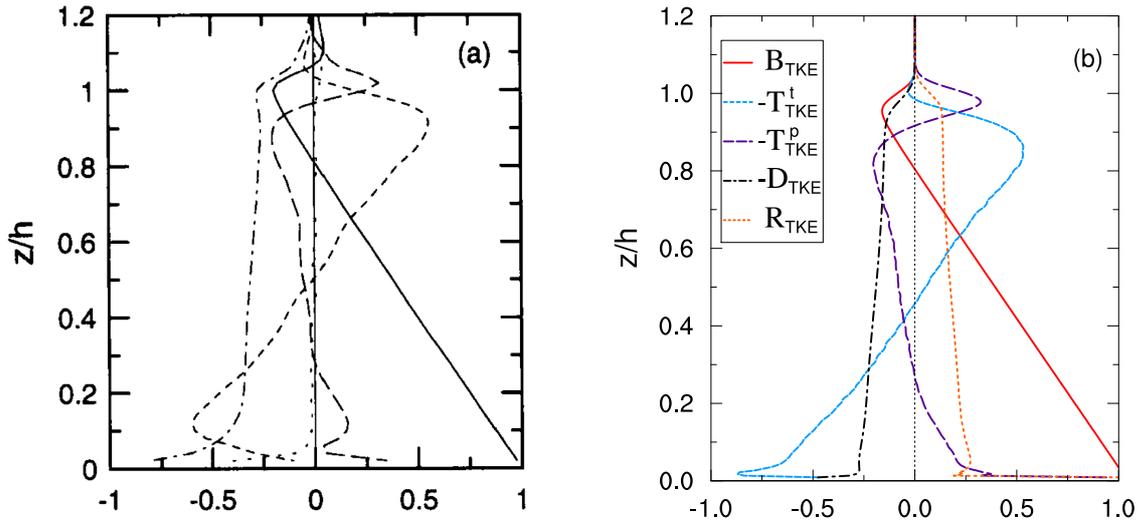


Abbildung 5.1: Vertikalprofile von Bilanztermen der turbulenten kinetischen Energie TKE für die trockene konvektive Grenzschicht. (a) ist ein Nachdruck von MIRONOV *et al.* (2000, Abb. 11a) mit Genehmigung von John Wiley & Sons und (b) enthält die in dieser Arbeit ermittelten Bilanzterme, deren Vorzeichen so wie in der TKE-Gleichung 3.16 verwendet werden. Durchgezogene Linien kennzeichnen Auftriebsproduktion B_{TKE} , kurz gestrichelte Linien turbulenten Transport \mathcal{T}_{TKE}^t , lang gestrichelte Linien Transport durch Druckfluktuationen \mathcal{T}_{TKE}^p , strich-gepunktete Linien Dissipation \mathcal{D}_{TKE} und gepunktete Linien Residuen \mathcal{R}_{TKE} . Die Terme werden mit $w_*^3 h^{-1}$ normiert und in (b) über zwei Stunden gemittelt.

(2000) erfolgt zunächst die Normierung mit der Grenzschichthöhe h und dann die zeitliche Mittelung der Profile über mehrere konvektive Zeitskalen t_* . Bei den in dieser Arbeit bestimmten Profilen ist die Reihenfolge vertauscht, sodass die Bilanzterme durch die über den Mittelungszeitraum anwachsende Grenzschicht bei z_i leicht „verschmieren“. Damit ist auch verbunden, dass bei FC (Abb. 5.1b) trotz der Normierung mit den Deardorffschen Skalen der Auftriebsterm B_{TKE} in Bodennähe nicht exakt den Wert Eins liefert.

Abb. 5.1 ist zu entnehmen, dass TKE bis in eine Höhe von $0.8h$ durch Auftrieb produziert wird, wobei die Auftriebsproduktion B_{TKE} aufgrund der Heizung am Boden auch dort maximal ist. Im Entrainmentbereich wird TKE durch Auftrieb vernichtet. Dissipation \mathcal{D}_{TKE} führt in der gesamten Grenzschicht zu einem Verlust von TKE. Der turbulente Transport \mathcal{T}_{TKE}^t verteilt TKE um und transportiert die in der unteren Hälfte erzeugte turbulente kinetische Energie in die obere Hälfte der Grenzschicht. \mathcal{T}_{TKE}^t ist stärker ausgeprägt als der Transport \mathcal{T}_{TKE}^p durch Druckfluktuationen, der die TKE aus der Mitte der Grenzschicht in den oberen und unteren Grenzschichtbereich umverteilt. Ein Vergleich der Dissipationsraten in Abb. 5.1a und 5.1b zeigt, dass die in dieser Arbeit bestimmte Dissipationsrate nur halb so groß wie bei MIRONOV *et al.* (2000) ist. Dies lässt sich auch am Residuum \mathcal{R}_{TKE} ablesen, welches über $\mathcal{R}_{TKE} = B_{TKE} - \mathcal{T}_{TKE}^t - \mathcal{T}_{TKE}^p - \mathcal{D}_{TKE} - \mathcal{M}_{TKE}$ als Summe aller Bilanzterme bestimmt wird und ein Spiegelbild der Dissipation darstellt. Die zeitliche Änderung \mathcal{M}_{TKE} wird in Abb. 5.1 nicht dargestellt, weil es sich hier um einen quasi-stationären Fall handelt, bei dem sich die TKE zeitlich kaum ändert. Daher ist \mathcal{M}_{TKE} vernachlässigbar. Die übrigen Terme der TKE-Bilanzgleichung 3.16 (\mathcal{S}_{TKE} und \mathcal{W}_{TKE}) sind Null, weil die Simulation ohne mittleren Wind und großräumiges Absinken an-

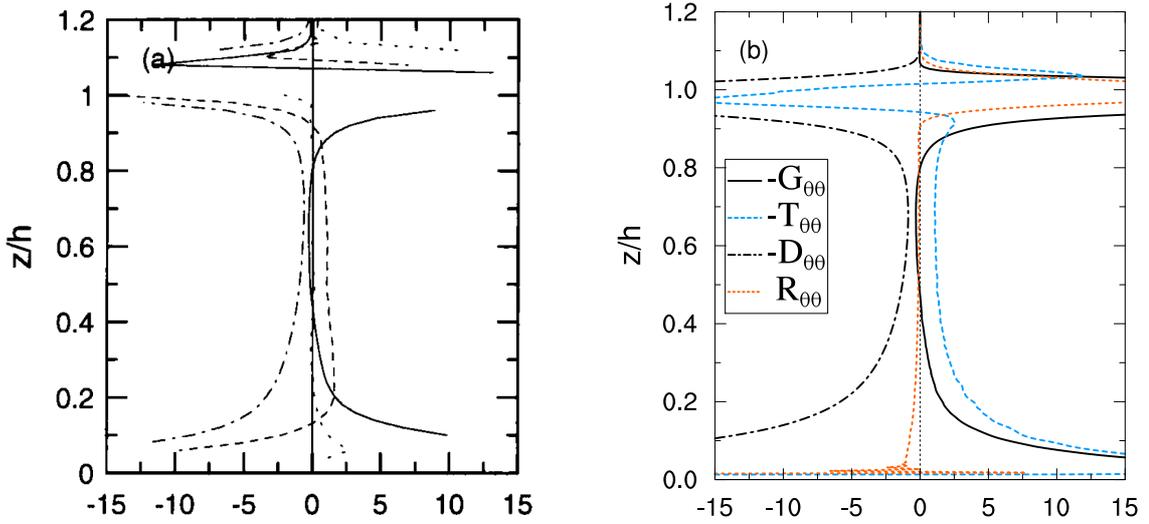


Abbildung 5.2: Vertikalprofile von Bilanztermen der Temperaturvarianz TT für die trockene konvektive Grenzschicht. (a) ist ein Nachdruck von MIRONOV *et al.* (2000, Abb. 12a) mit Genehmigung von John Wiley & Sons und (b) enthält die in dieser Arbeit ermittelten Bilanzterme, deren Vorzeichen so wie in Gl. 3.24 verwendet werden. Durchgezogene Linien kennzeichnen Produktion durch den mittleren Gradienten $\mathcal{G}_{\theta\theta}$, gestrichelte Linien turbulenten Transport $\mathcal{T}_{\theta\theta}$, strich-gepunktete Linien Dissipation $\mathcal{D}_{\theta\theta}$ und gepunktete Linien Residuen $\mathcal{R}_{\theta\theta}$. Die Terme werden mit $w_* \theta_*^2 h^{-1}$ normiert und in (b) über zwei Stunden gemittelt.

getrieben wird (siehe auch Abschnitt 4.1). Um von einer gut geschlossenen Bilanz sprechen zu können, sollte das Residuum klein gegenüber den Termen mit der größten Bedeutung sein (MIRONOV *et al.*, 2000). Dies ist zwar bei MIRONOV *et al.* (2000) (Abb. 5.1a) der Fall, aber nicht bei der in dieser Arbeit bestimmten Bilanz (Abb. 5.1b). Dies bedeutet, dass sich die numerisch bestimmten Bilanzterme gegenseitig nicht aufheben. Die Gründe dafür werden im nachfolgenden Abschnitt 5.1.2 aufgezeigt.

Ein Vergleich der Bilanzterme der Temperaturvarianz $TT = 0.5 \left(\langle \overline{\theta'^2} \rangle + \langle \vartheta \rangle \right)$ zeigt eine gute Übereinstimmung der einzelnen Terme (Abb. 5.2). Nur der turbulente Transportterm $\mathcal{T}_{\theta\theta}$ weicht für $z < 0.2h$ von MIRONOV *et al.* (2000) ab, indem sich ein ausgeprägtes Maximum bei $z = 0.1h$ ausbildet, bevor der Term wie bei MIRONOV *et al.* (2000) negativ wird. Bei der Bilanz der Temperaturvarianz lässt sich auch der im vorherigen Abschnitt beschriebene Versatz in der Nähe von $z = h$ ausmachen. Abb. 5.2 veranschaulicht, dass der mittlere Gradiententerm $\mathcal{G}_{\theta\theta}$ in der Mitte der Grenzschicht nahe Null ist, sodass dort Transport $\mathcal{T}_{\theta\theta}$ und Dissipation $\mathcal{D}_{\theta\theta}$ von Temperaturvarianz im Gleichgewicht stehen. Die Produktion von Varianz durch den mittleren Gradienten der Temperatur erfolgt zum einen in der Nähe des Bodens und zum anderen im Inversionsbereich, wo sich ausgeprägte Gradienten der Temperatur befinden. In diesen Bereichen wird die Produktion vornehmlich durch Dissipation ausgeglichen. Das in Abb. 5.2b dargestellte Residuum $\mathcal{R}_{\theta\theta} = -\mathcal{G}_{\theta\theta} - \mathcal{T}_{\theta\theta} - \mathcal{D}_{\theta\theta} - \mathcal{M}_{\theta\theta}$ (siehe auch Gl. 3.24) ist nahezu über die gesamte Grenzschicht gering. Lediglich im Inversionsbereich und nahe dem Erdboden, welches die Bereiche darstellen, in denen eine LES aufgrund eines höheren Beitrags des SGS-Modells weniger vertrauenswürdig ist, stellt sich ein größeres Residuum ein. Insgesamt betrachtet wird die Bilanz der Temperaturvarianz gut geschlossen, da das Residuum selbst in den für

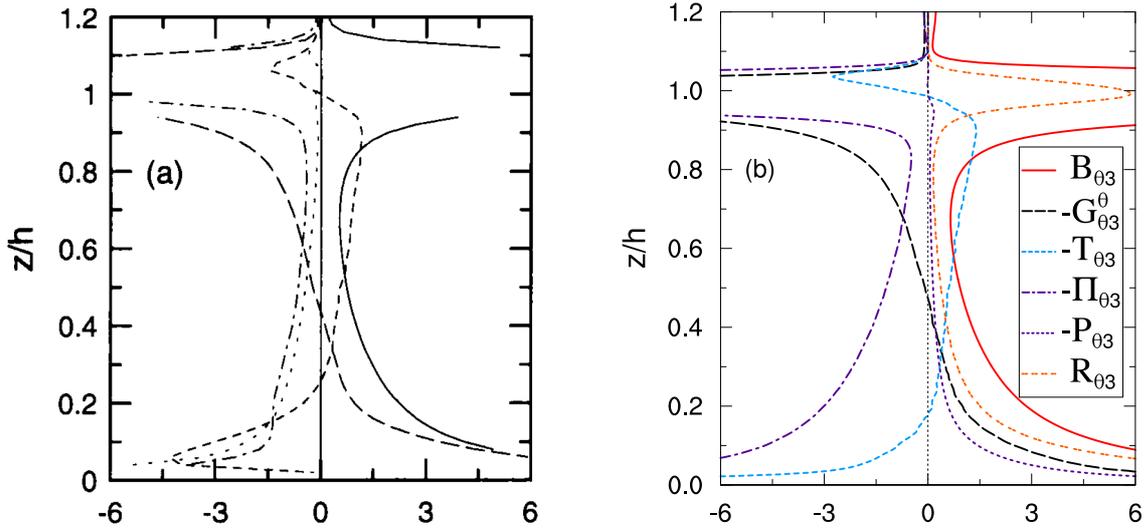


Abbildung 5.3: Vertikalprofile von Bilanztermen des vertikalen Temperaturflusses WT für die trockene konvektive Grenzschicht. (a) ist ein Nachdruck von MIRONOV *et al.* (2000, Abb. 13a) mit Genehmigung von John Wiley & Sons und (b) enthält die in dieser Arbeit ermittelten Bilanzterme, deren Vorzeichen so wie in Gl. 3.17 verwendet werden. Durchgezogene Linien kennzeichnen Produktion durch Auftrieb B_{θ_3} , lang gestrichelte Linien Produktion durch den mittleren Gradienten $G_{\theta_3}^{\theta}$, kurz gestrichelte Linien turbulenten Transport T_{θ_3} , strich-gepunktete Linien Temperatur-Druckgradient-Kovarianz Π_{θ_3} , gepunktete Linien SGS-Druckterm P_{θ_3} und die orange gepunktete Linie in (b) das Residuum. Die Terme werden mit $w_*^2 \theta_* h^{-1}$ normiert und in (b) über zwei Stunden gemittelt.

LES kritischen Regionen kleiner als die maßgeblichen Beiträge durch Gradientproduktion und Dissipation ist.

Für den Vergleich der Bilanz des vertikalen Temperaturflusses $WT = \langle \overline{w'\theta'} \rangle + \langle \tau_{\theta_3} \rangle$ mit MIRONOV *et al.* (2000) (Abb. 5.3) lassen sich ähnliche Aussagen wie für die Bilanz der Temperaturvarianz treffen. Sowohl der Verlauf als auch der Betrag der Bilanzterme stimmen sehr gut überein. Erzeugt wird der vertikale Temperaturfluss vor allem in Bodennähe und im Inversionsbereich durch Auftrieb B_{θ_3} . Der mittlere Gradiententerm $G_{\theta_3}^{\theta}$ stellt eine Quelle für WT in der unteren Hälfte der Grenzschicht dar und ist eine Senke in der oberen Hälfte. Transport T_{θ_3} ist vor allem in der Mitte der Grenzschicht entscheidend. Die Bilanz wird mit der Temperatur-Druckgradient-Kovarianz $\Pi_{\theta_3} + P_{\theta_3}$ ausgeglichen, durch die vertikaler Temperaturfluss vernichtet wird. Das Residuum ist für $0.2h < z < 0.8h$ verschwindend gering und darunter bzw. darüber kleiner als nahezu alle anderen Terme, sodass die Bilanz gut geschlossen wird. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass der subskalige Anteil P_{θ_3} der Druck-Kovarianz zwar klein, aber vor allem in Bodennähe signifikant ist. Daher ist P_{θ_3} nicht vernachlässigbar, sondern trägt vielmehr zu einer guten Schließung der Bilanz bei.

Der durchgeführte Vergleich verdeutlicht, dass die Bestimmung von Bilanztermen unter Verwendung der Summe aus aufgelösten und subskaligen Bilanzen eine gute Übereinstimmung mit MIRONOV *et al.* (2000) liefert. Die gute Schließung der Bilanzen der Temperaturvarianz und des vertikalen Temperaturflusses zeigt exemplarisch, dass aus den LES-Daten unter Verwendung der in Kap. 3.1 beschriebenen Methode, belastbare Bilanzterme

bestimmt werden können.

5.1.2 Schließung der Bilanz der turbulenten kinetischen Energie

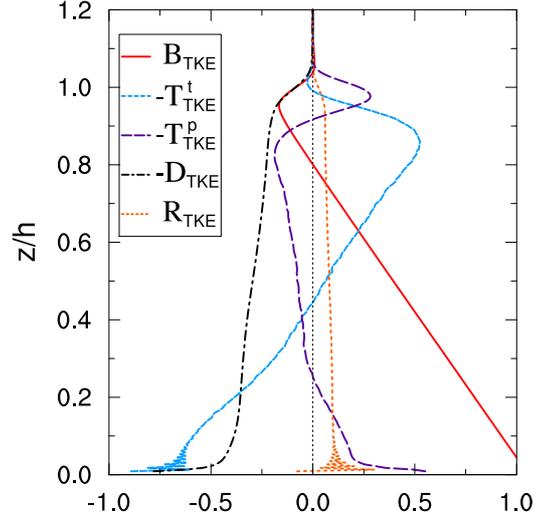
Nachfolgend soll aufgezeigt werden, welche Faktoren dazu führen, dass die TKE-Bilanz ein verhältnismäßig großes Residuum aufweist. Dabei ist das Residuum \mathcal{R}_{TKE} über die Summe der Bilanzterme definiert. Damit zeigt $\mathcal{R}_{\text{TKE}} > 0$ in Abb. 5.1b an, dass die Ver-nichtung von TKE zu gering ist, um die Bilanz auszugleichen. Diese Beobachtung und der Vergleich der Bilanzterme mit MIRONOV *et al.* (2000) in Abschnitt 5.1 verdeutlichen, dass die Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}} = \langle \epsilon \rangle$ hauptsächlich für das Residuum verantwortlich ist, weil sie zu gering ist, um die Bilanz zu schließen. Daraus lässt sich nun die Frage ableiten, wovon die Dissipationsrate eigentlich abhängt.

Dissipation bezeichnet die durch molekulare Reibung hervorgerufene Umwandlung von Bewegungsenergie in innere Energie (z.B. ETLING, 2002, S. 273). Die molekulare Reibung erfolgt also bei den kleinen Skalen, die bei der LES mit dem Subskalenmodell behandelt werden. Daher ist Dissipation von TKE mit subskaligen Vorgängen verknüpft.

Die Dissipationsrate zeigt sich nun abhängig vom verwendeten Advektionsverfahren. Wird statt des Verfahrens fünfter Ordnung nach WICKER und SKAMAROCK (2002) (WS) das zentrierte Verfahren zweiter Ordnung nach PIACSEK und WILLIAMS (1970) (PW) verwendet, verdoppelt sich die Dissipationsrate nahezu und das Residuum nimmt entsprechend ab, wie ein Vergleich von Abb. 5.1b und 5.4 zeigt. Die übrigen Bilanzterme zeigen sich außer in Bodennähe nicht abhängig vom Advektionsverfahren. Die Abhängigkeit der Dissipationsrate geht größtenteils auf den Einfluss von numerischer Dissipation zurück. Im WS-Verfahren wirkt im Gegensatz zum PW-Verfahren zusätzlich zur Dissipation im Subskalenmodell noch künstlich hinzugefügte numerische Dissipation auf die Gleichungen. Durch die numerische Dissipation werden die Geschwindigkeitsfelder und damit auch ihre Gradienten geglättet. Diese im Vergleich zum PW-Verfahren kleineren Gradienten gehen auch in das Subskalenmodell ein und führen dazu, dass weniger subskalige TKE produziert wird. Dies hat wiederum zur Folge, dass auch weniger subskalige TKE dissipiert wird und somit die Dissipationsrate kleiner ausfällt. Diese Abhängigkeit beobachten auch MARONGA *et al.* (2012) und zeigen anhand von Spektren der TKE, die mit PALM erzeugt wurden (MARONGA *et al.*, 2012, Abb. 7), dass die spektrale Energie aufgrund von numerischer Dissipation vor allem im Bereich hoher Wellenzahlen, also kleiner Turbulenzelemente, absinkt. Dies resultiert in zu wenig Energie in den kleinsten aufgelösten Skalen. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass im Verfahren fünfter Ordnung die numerische Dissipation Energie selektiv bei den kleinen Skalen entfernt (MORINISHI *et al.*, 1998). Das dadurch hervorgerufene, signifikante Residuum der TKE-Bilanz wird auch mit anderen, PALM relativ ähnlichen LES-Modellen wie dem *Dutch Atmospheric Large-Eddy Simulation* (DALES) (HEUS *et al.*, 2010) beobachtet (PINO, 2011).

Die numerische Dissipation erklärt also ca. 50% des in der TKE-Bilanz auftretenden Residuums und fehlt in \mathcal{D}_{TKE} . Abb. 5.4 zeigt allerdings auch, dass ohne numerische Dissipation zwar ein kleineres, aber im Vergleich zu Abb. 5.1a dennoch signifikantes Residuum bestehen bleibt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass in eine LES zusätzlich zum Advektionsverfahren noch weitere Approximationen einfließen, die zu numerischen Fehlern führen. Durch die Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen und die Approximation mit Differenzenquotienten werden Diskretisierungsfehler hervorgerufen. Diese Fehler sind in der Regel sogar größer als die Terme des Subskalenmodells (GHOSAL, 1996). Auch das Zeitschrittverfahren bringt Approximationen ein, die zu numerischen Fehlern führen. Beim Vergleich des Residuums der TKE-Bilanz mit MIRONOV *et al.* (2000) (Abb. 5.1) sollte außerdem

Abbildung 5.4: Vertikalprofile der Bilanzterme der TKE der trockenen konvektiven Grenzschicht bei Verwendung des zenrierten Advektionsverfahrens nach PIACSEK und WILLIAMS (1970). Dargestellte Terme, Normierung und zeitliche Mittelung werden wie in Abb. 5.1 verwendet.



beachtet werden, dass MIRONOV *et al.* (2000) ein pseudo-spektrales LES-Modell verwenden, in dem die horizontalen Ableitungen im Frequenzraum berechnet werden. In PALM hingegen werden finite Differenzen verwendet. Die Genauigkeit von Spektralmodellen ist generell höher als die von Modellen mit finiten Differenzen (GLENEDENING und HAACK, 2001). Daraus lässt sich folgern, dass mit PALM generell Bilanzen mit größeren Residuen als bei MIRONOV *et al.* (2000) simuliert werden.

Zusätzlich zum Einfluss der Numerik wird nachfolgend untersucht, inwiefern sich die Methode zur Bestimmung von Dissipationsraten aus LES-Daten auf das Residuum der TKE-Bilanz auswirkt. Neben der in dieser Arbeit verwendeten Vorgehensweise, die Dissipationsrate mittels (2.31) aus dem Subskalenmodell abzuschätzen, gibt es noch weitere Möglichkeiten, $\langle \epsilon \rangle$ zu bestimmen, die nachfolgend kurz erläutert werden.

Die Dissipationsrate kann zum einen mittels eines spektralen Transferterms wie bei (MOENG, 1986) bestimmt werden. Dieser Term kommt in der Bilanzgleichung für die aufgelöste turbulente kinetische Energie $1/2 \langle \overline{u_i''^2} \rangle$ vor und ergibt sich analog zum Transferterm in der Bilanzgleichung A.2 der aufgelösten skalaren Varianz. Er lautet

$$\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{tr}} = \left\langle \overline{u_i''} \frac{\partial \tau_{ij}''}{\partial x_j} \right\rangle \quad (5.1)$$

und beschreibt den Transfer von TKE zwischen aufgelöster und Subgridskala. Dieser Term kommt mit unterschiedlichen Vorzeichen in den Bilanzgleichungen der aufgelösten und der subskaligen TKE vor und hebt sich bei Addition auf.

Zum anderen kann eine Dissipationsrate ϵ_{sp} aus Spektren der Geschwindigkeitskomponenten abgeleitet und wie bei CUIJPERS *et al.* (1996) in der TKE-Bilanz verwendet werden. Dazu wird von der Beziehung ausgegangen, dass für die spektrale Energie $P_{\overline{u}_i}$ einer Geschwindigkeitskomponente \overline{u}_i im Inertialbereich des Spektrums

$$P_{\overline{u}_i}(k) = c_{\alpha_i} \alpha \epsilon_{\text{sp},i}^{2/3} k^{-5/3} \quad (5.2)$$

gilt (TENNEKES und LUMLEY, 1972, S. 265f). Dabei bezeichnet $\alpha \approx 0.52$ die Kolmogorov-Konstante und $c_{\alpha_1} = c_{\alpha_2} = 1$ sowie $c_{\alpha_3} = 4/3$. Nach Bestimmung des Spektrums $P_{\overline{u}_i}$ wird auf logarithmischer Skala der Bereich lokalisiert, in dem eine Steigung von $k^{-5/3}$ herrscht. In diesem Bereich wird (5.2) nach $\epsilon_{\text{sp},i}$ umgestellt (z.B. STULL, 1988, S. 430f; KAISER und FEDOROVICH, 1998). Um $\epsilon_{\text{sp},i}$ für die in dieser Arbeit untersuchte trockene

konvektive Grenzschicht zu bestimmen, wird konkret nach der in MARONGA *et al.* (2012) verwendeten Methode verfahren¹, die auf der zuvor genannten Vorgehensweise basiert und zusätzlich noch eine Mittelung von $\epsilon_{\text{sp},i}$ über alle Wellenzahlen k im Inertialbereich enthält. Diese Mittelung wird durchgeführt, um die statistischen Schwankungen, welche die Spektren aufweisen, zu reduzieren und damit die Repräsentanz der Dissipationsrate zu erhöhen. Wie in CUIJPERS *et al.* (1996) wird $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{SP}} = \langle \epsilon_{\text{sp}} \rangle$ als Mittel der Dissipationsraten aus den drei Geschwindigkeitsfeldern bestimmt, sodass $\epsilon_{\text{sp}} = 1/3(\epsilon_{\text{sp},1} + \epsilon_{\text{sp},2} + \epsilon_{\text{sp},3})$ gilt.

Darüber hinaus kann eine Dissipationsrate auch durch Umstellen der TKE-Bilanz aus der Summe der übrigen Bilanzterme bestimmt werden (z.B. STULL, 1988, S. 431). Diese Vorgehensweise wird auch als *Residuenmethode* bezeichnet. Wird (3.16) nach der Dissipationsrate umgestellt und die Rate mit $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ bezeichnet, folgt

$$\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}} = -\mathcal{S}_{\text{TKE}} + \mathcal{B}_{\text{TKE}} - \mathcal{W}_{\text{TKE}} - \mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{t}} - \mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{p}} - \mathcal{M}_{\text{TKE}}. \quad (5.3)$$

Aufgrund der Definition der Dissipationsrate als Summe der TKE-Bilanzterme liefert diese Methode immer ein Residuum \mathcal{R}_{TKE} von Null. Allerdings beinhaltet $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ dann auch alle mit den übrigen Termen verbundene Unsicherheiten, die sich z.B. aufgrund des Einflusses der Numerik ergeben.

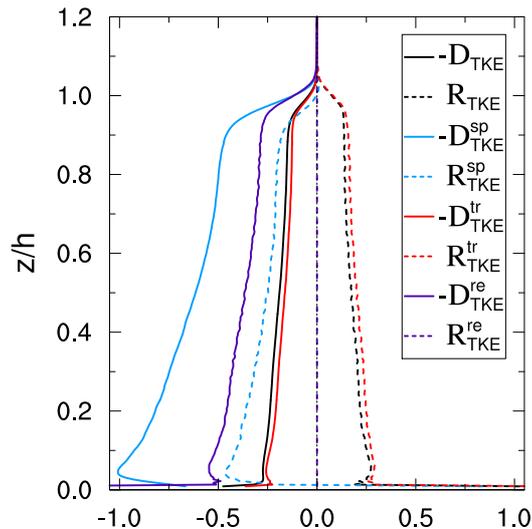
Abb. 5.5 enthält die Dissipationsraten \mathcal{D}_{TKE} , $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{SP}}$, $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{tr}}$, $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ und die sich bei Verwendung dieser Raten einstellenden Residuen. Die Bestimmung der Dissipationsrate mittels des Transferterms (rote Linien) liefert in etwa dieselbe Rate und damit dasselbe Residuum wie bei Verwendung der Dissipationsrate aus dem Subskalenmodell (schwarze Linien). Dies ist konsistent, da in $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{tr}}$ (Gl. 5.1) der SGS-Impulsfluss τ_{ij} einfließt, welcher auch aus dem Subskalenmodell stammt. Damit gehen beide Dissipationsraten aus dem Subskalenmodell hervor, welches ihre Ähnlichkeit erklärt. Die aus Geschwindigkeitsspektren bestimmte Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{SP}}$ (blaue Linie) ist mehr als dreimal so groß wie \mathcal{D}_{TKE} aus dem Subskalenmodell. Das zugehörige Residuum ist negativ und zeigt damit an, dass $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{SP}}$ im Gegensatz zu \mathcal{D}_{TKE} und $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{tr}}$ eine zu große Rate liefert. Wird die aus der Residuenmethode stammende Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ (violette Linie) verwendet, folgt aufgrund der Definition (5.3) ein Residuum von Null. Der Verlauf von $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ für $z > 0.05 h$ und die Größenordnung stimmen mit der in MIRONOV *et al.* (2000) (Abb. 5.1a) gezeigten Dissipationsrate überein. Daraus lässt sich folgern, dass die Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ eine gute Schätzung für die Dissipationsrate der TKE-Bilanz liefert, auch wenn sie die bei der LES auftretenden numerischen Fehler enthält.

Die Überschätzung der Dissipation bei Verwendung der aus Spektren ermittelten Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{SP}}$ scheint zunächst eigenartig, da mit dieser Methode die Dissipation direkt aus dem Inertialbereich bestimmt wird, woraus sich die tatsächlich wirkende Dissipation ergibt. Allerdings geben MARONGA *et al.* (2012) an, dass bei Benutzung des WS-Verfahrens die obere Grenze des Inertialbereichs in PALM bei $k \approx 2\pi/6\Delta$ liegt und damit alle Wellenzahlen bis hin zur räumlichen Abschneidelänge, die bei $k = 2\pi/2\Delta$ liegt, die Auswirkungen von numerischer Dissipation spüren. Die im LES-Modell prognostizierten Größen beinhalten nun alle Skalen bis hin zu $k = 2\pi/2\Delta$ und sind demnach von numerischer Dissipation beeinflusst. Folglich werden die aus den LES-Größen berechneten TKE-Bilanzterme nicht auf der gleichen Skala wie die Dissipationsrate aus dem Inertialbereich bestimmt und sind damit nicht vergleichbar. Daher führt die Verwendung von $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{SP}}$ nicht zu einer besseren Schließung der TKE-Bilanz.

Das verhältnismäßig große Residuum der TKE-Bilanz lässt sich also zusammenfassend auf die Numerik des LES-Modells zurückführen. Da die Residuenmethode die einzige der in

¹Die Auswertesoftware zur Bestimmung von $\epsilon_{\text{sp},i}$ aus eindimensionalen Geschwindigkeitsspektren wurde von Björn Maronga zur Verfügung gestellt.

Abbildung 5.5: Vertikalprofile der Dissipationsraten und entsprechende Residuen der TKE-Bilanz bei Verwendung des WS-Advektionsverfahrens. Durchgezogene Linien geben die Dissipationsraten und gestrichelte Linien die dazugehörigen Residuen an. Die Erläuterung der dargestellten Größen erfolgt im Text. Die Terme werden mit $w_*^3 h^{-1}$ normiert und über zwei Stunden gemittelt.



dieser Arbeit untersuchten Methoden ist, die eine mit MIRONOV *et al.* (2000) vergleichbare und damit belastbare Dissipationsrate liefert, wird $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ anstelle von \mathcal{D}_{TKE} als Abschätzung für die TKE-Dissipationsrate verwendet. Die Dissipationsrate fließt auch in die Bilanzgleichungen (3.12) der Geschwindigkeitsvarianzen ein und wird konsistenterweise auch dort mit der Residuenmethode abgeschätzt.

Auch die skalaren Varianzgleichungen (3.24) und (3.25) enthalten Dissipation. Wie der Vergleich mit MIRONOV *et al.* (2000) und das relativ kleine Residuum der Bilanz der Temperaturvarianz zeigen (Abb. 5.2), liefert (3.27) allerdings eine gute Schätzung für die Dissipationsrate der Temperaturvarianz. Obwohl auch die Dissipationsraten der skalaren Varianzen von numerischer Dissipation beeinflusst sind, liegt hier ein kleineres Residuum als bei der TKE-Bilanz vor, weil die Auswirkungen der numerischen Dissipation auf die skalaren Varianzen geringer ausfallen. Dies lässt sich an den bei MARONGA *et al.* (2012, Abb. 7) dargestellten Spektren erkennen. Sie zeigen, dass die Spektren der Temperatur und Feuchte aufgrund von numerischer Dissipation im Bereich großer Wellenzahlen nicht so stark abfallen wie die Spektren der TKE. Aufgrund der relativ guten Schließung der skalaren Varianzen außer am Oberrand der Grenzschicht ist es also nicht notwendig, die Residuenmethode bei den skalaren Varianzen zu verwenden.

Mit der in dieser Arbeit verwendeten Methode, die Bilanzterme aus den prognostizierten LES-Feldern zu bestimmen, können die Bilanzen nicht zu Maschinengenauigkeit geschlossen werden. Es ist aber dennoch möglich, Bilanzen mit relativ kleinen Residuen zu bestimmen, sodass sie im Hinblick auf die Überprüfung von Turbulenzmodellen verwendet werden können. Falls eine Schließung zu Maschinengenauigkeit gefordert wird, kann nach der in GOLAZ *et al.* (2005) beschriebenen Methode vorgegangen werden. GOLAZ *et al.* (2005) bestimmen Bilanzterme direkt im LES-Code während der Prognose und setzen sie danach mit den Termen der entsprechenden Bilanz im Ensemble-Mittel in Verbindung. Der Nachteil dieser Methode besteht darin, dass mit ihr ausschließlich die aufgelösten Bilanzterme bestimmt werden können und nicht die subskaligen Anteile. GAO *et al.* (1994) zeigen eine weitere Methode auf, um Bilanzen zu erhalten, die zu Maschinengenauigkeit geschlossen werden können. Dieser Ansatz wurde in das DALES-Modell implementiert, liefert aber bei Verwendung des WS-Advektionsverfahrens aufgrund numerischer Dissipation immer noch ein signifikantes Residuum in der TKE-Bilanz (PINO, 2011), sodass mit dieser Methode in DALES bisher keine numerisch exakte Schließung erzielt werden konnte.

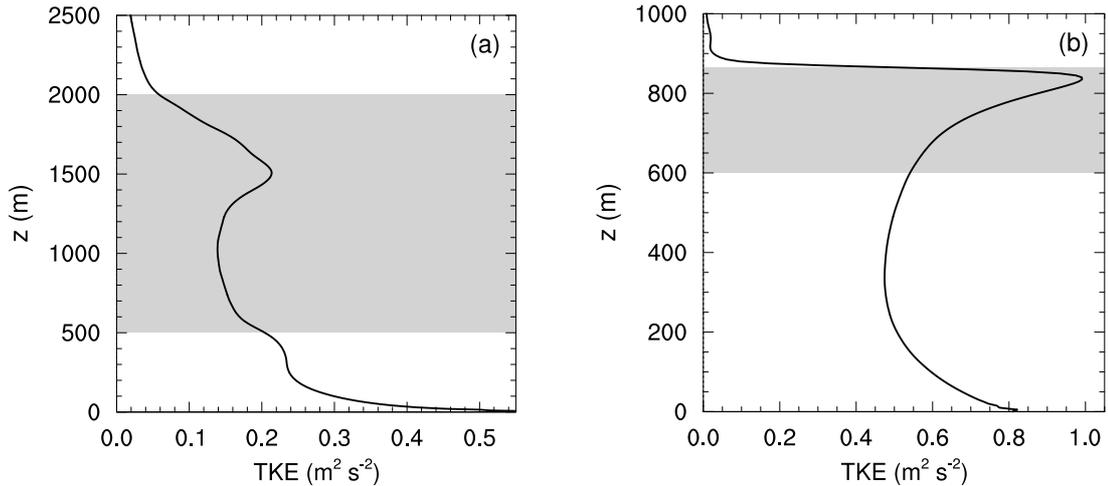


Abbildung 5.6: Vertikalprofile der turbulenten kinetischen Energie TKE für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Bereiche der Kumulus- und Stratokumulusbewölkung sind jeweils grau unterlegt. Der Mittelungszeitraum beträgt 3 h bei BOMEX und 2 h bei DYCOMS. Es wird keine Normierung verwendet.

5.2 Bilanzen der turbulenten kinetischen Energie

Das in Abb. 5.6a dargestellte Profil der TKE verdeutlicht, dass die TKE bei der Kumulusbedeckten Grenzschicht aufgrund von Scherung in Nähe der Oberfläche maximal ist. Sie nimmt bis $z \approx 1000$ m mit der Höhe ab und weist am Oberrand der feucht-labilen Schicht ein weiteres Maximum auf. Dort wird bei der Wolkenbildung latente Wärme frei, welches zu Produktion von TKE führt. Bei der Stratokumulusbedeckten Grenzschicht zeigt die TKE ein scherungsbedingtes Maximum in Oberflächennähe und ein Maximum am Grenzschichtoberrand (Abb. 5.6b). Dort wird aufgrund von langwelliger Strahlungsabkühlung besonders viel TKE produziert.

Die einzelnen Terme der Bilanzgleichung der TKE (Gl. 3.16) beschreiben physikalische Prozesse, die Turbulenz erzeugen bzw. vernichten können. Aus der relativen Größe der Terme zueinander lässt sich ableiten, welche Mechanismen zur Aufrechterhaltung oder Vernichtung von Turbulenzenergie von Bedeutung sind. Zur Interpretation der Bilanzterme ist zu erwähnen, dass ein positiver Bilanzterm in einer Höhe Produktion von TKE und ein negativer Term Vernichtung von TKE angibt, weil TKE positiv definit ist. Generell ist zur Darstellung aller Bilanzterme in Kapitel 5 anzumerken, dass sie mit den Vorzeichen in den Abbildungen erscheinen, die sie auch in den Bilanzgleichungen haben.

Durch Scherung (\mathcal{S}_{TKE}) des Grundstroms wird bei beiden bewölkten Grenzschichten TKE produziert (Abb. 5.7). Da die Gradienten der mittleren Geschwindigkeit in der Nähe der Oberfläche maximal sind, weist auch die Scherungsproduktion dort ihr Maximum auf. Bei BOMEX wird auch noch im unteren Bereich der Wolkenschicht TKE durch Scherung produziert. Dies rührt daher, dass sich in diesem Bereich der Grenzschichtwind in Richtung des geostrophischen Windes dreht und somit Scherung hervorgerufen wird. Im Gegensatz zur Scherungsproduktion macht sich der Einfluss von Auftrieb (\mathcal{B}_{TKE}) in der gesamten Grenzschicht bemerkbar. In beiden Fällen nimmt der Auftriebsterm bis zum Unterrand der Wolkenschicht linear ab, wo er minimal wird. BOMEX und DYCOMS weisen beide in ihren Wolkenschichten hohe Produktion von TKE durch Auftrieb auf. Dies wird zum einen durch das Freisetzen latenter Wärme und insbesondere bei DYCOMS durch

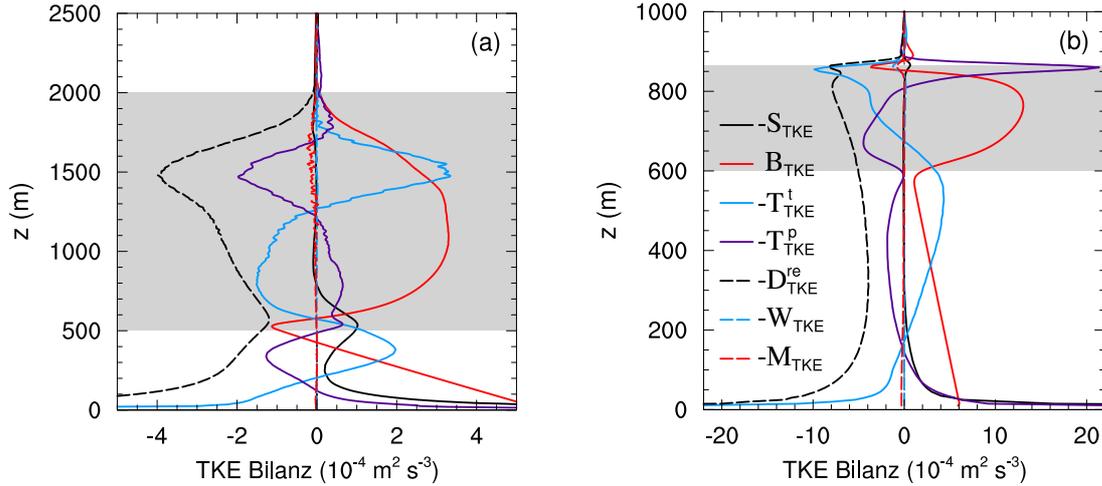


Abbildung 5.7: Vertikalprofile der Bilanzterme der TKE für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Es wird die Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ verwendet (siehe Gl. 5.3), die aus der Residuenmethode folgt. Die Bezeichnung der übrigen Bilanzterme ist Gl. 3.16 zu entnehmen. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

die strahlungsbedingte Abkühlung am Wolkenoberrand hervorgerufen. Am Oberrand der Mischungsschicht, welcher sich bei BOMEX bei $z = 500 \text{ m}$ (Abb. 5.7a) und bei DYCOMS wegen der Kopplung mit der Wolkenschicht am Oberrand der Grenzschicht bei $z = 850 \text{ m}$ (Abb. 5.7b) befindet, ist \mathcal{B}_{TKE} negativ. Dort wird also TKE durch Auftrieb vernichtet, weil durch Entrainment trockenere und wärmere Luft aus dem Inversionsbereich eingemischt wird. Dissipation $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$, die mittels der im vorherigen Abschnitt 5.1.2 beschriebenen Residuenmethode bestimmt wird, ist in der gesamten Kumulus- und Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht eine Senke von TKE. Dissipation ist vor allem dort signifikant, wo auch die Produktion durch Auftrieb und Scherung von Bedeutung ist. Bei beiden Grenzschichten ist dies in der Nähe der Oberfläche und innerhalb der Wolkenschicht der Fall.

Transport ($\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$, $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^p$) bewirkt eine Umverteilung von TKE und führt über die gesamte Grenzschicht betrachtet nicht zur Erzeugung oder Vernichtung von TKE, wie in Abschnitt 3.1.1 dargelegt wird. Transportterme als solche sind Terme, die die Divergenz des Flusses des jeweiligen Moments zweiter Ordnung enthalten (siehe z.B. Gl. 3.16). Damit ist für den Transport entscheidend, wie sich die Flüsse vertikal ändern. Nimmt bspw. der Fluss der TKE mit der Höhe zu, so verlässt mehr aufwärts gerichteter Fluss eine Höhe als von unten nach kommt. Es stellt sich also eine Divergenz ein, die zu einer Verringerung von TKE in dieser Höhe führt (z.B. STULL, 1988, S. 161f). Der Transportterm ist dann negativ und zeigt damit an, dass TKE aus dieser Höhe wegtransportiert wird. Ein positiver Transportterm in einer Höhe gibt dementsprechend an, dass TKE in diese Höhe transportiert wird, welches die TKE in diesem Höhenbereich erhöht und somit eine lokale Quelle von TKE darstellt.

Der Verlauf von $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ in Abb. 5.7a zeigt an, dass bei der Kumulus-bedeckten Grenzschicht TKE durch Turbulenz aus der unteren Hälfte der trockenen Mischungsschicht in die obere Hälfte und von der unteren Hälfte der Wolkenschicht in die obere Hälfte transportiert wird. Durch den Transport gelangt also TKE, die in Nähe der Oberfläche erzeugt wird, jeweils in darüber liegende Schichten und wird umverteilt. Bei der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht (Abb. 5.7b) kann aus dem Verlauf von $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ abgeleitet werden,

dass die in Oberflächennähe erzeugte TKE in die Mitte der trockenen Mischungsschicht transportiert wird. In der Stratokumulusschicht ist $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{t}}$ weitestgehend negativ und zeigt an, dass TKE aus der Wolkenschicht in die darunterliegende trockene Mischungsschicht transportiert wird. Also wird die vornehmlich durch Strahlungsabkühlung erzeugte TKE am Wolkenoberrand in darunterliegende Schichten umverteilt. Sowohl bei BOMEX als auch bei DYCOMS ist der turbulente Transport unterhalb der Wolkenschicht, wo die Auftriebsproduktion klein (Abb. 5.7b) bzw. negativ ist (Abb. 5.7a) wichtig, um die Bilanz von TKE aufrecht zu erhalten. Auch in den oberen Bereichen der Wolkenschichten ist $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{t}}$ größer als die meisten anderen Terme. In diesen Bereichen sind die turbulenten Transportmechanismen also nicht vernachlässigbar.

Bei BOMEX weist der Transport $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{p}}$ durch Druckfluktuationen (Abb. 5.7a) einen fast spiegelbildlichen Verlauf im Vergleich zu $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{t}}$ auf, ist jedoch weniger stark ausgeprägt. Der Transport erfolgt aus der oberen in die untere Wolkenschicht sowie vom oberen in den unteren Bereich der trockenen Mischungsschicht und gleicht damit einen Großteil des turbulenten Transports aus. Bei DYCOMS (Abb. 5.7b) weist $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{p}}$ ein ausgeprägtes Maximum am Oberrand der Grenzschicht aus und stellt dort die alleinige Quelle für die Produktion von TKE dar. Das Minimum von $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^{\text{p}}$ an der Wolkenbasis zeigt an, dass die im Zentrum der Stratokumulusschicht durch Auftrieb erzeugte TKE zum Oberrand der Grenzschicht und die unterhalb der Wolkenschicht befindliche TKE zur oberflächennahen Schicht transportiert wird.

Die zeitliche Änderung \mathcal{M}_{TKE} der TKE sowie der Einfluss von großräumigem Absinken sind in beiden Fällen vernachlässigbar (siehe Abb. 5.7). Beide Simulationen bilden folglich eine stationäre TKE-Bilanz aus.

Die Verläufe und relativen Verhältnisse der Bilanzterme zueinander sind in guter Übereinstimmung mit LES von Kumulus-bedeckten Grenzschichten von CUIJPERS *et al.* (1996) und BROWN (1999) sowie LES von Grenzschichten mit Stratokumulus von DEARDORFF (1980) und MOENG (1986). Im Vergleich zur scherungsfreien konvektiven Grenzschicht (Simulation FC, Abschnitt 5.1.1) wird bei BOMEX und DYCOMS die Auftriebsproduktion in der Nähe des Bodens signifikant durch Scherungsproduktion ergänzt. Die Transportmechanismen innerhalb der trockenen Mischungsschicht bei BOMEX gleichen denen bei der Simulation FC. Dies verdeutlicht, dass die Kumulus-bedeckte Grenzschicht wie die trockene konvektive Grenzschicht vornehmlich durch Heizen an der Oberfläche und dem sich daraus ergebenden Auftrieb angetrieben wird. Die Grenzschicht mit Stratokumulus hat ihren hauptsächlichsten Antrieb am Oberrand der Wolkenschicht, in der durch Strahlungsabkühlung eine Labilisierung hervorgerufen und Konvektion ausgelöst wird. Zusammenfassend lässt sich also festhalten, dass die TKE-Bilanz von bewölkten Grenzschichten generell aus einem Gleichgewicht zwischen Auftriebs- und Scherungsproduktion sowie Dissipation besteht. Allerdings ist auch der Transport, vor allem an den Rändern der Wolkenschichten, lokal von gewisser Bedeutung.

5.3 Bilanzen der Geschwindigkeitsvarianzen

Die in Abb. 5.8 dargestellten horizontalen Geschwindigkeitsvarianzen $UU = \langle \overline{u'^2} \rangle + \langle \tau_{11} \rangle$ und $VV = \langle \overline{v'^2} \rangle + \langle \tau_{22} \rangle$ sind bei BOMEX und DYCOMS jeweils in der Nähe der Oberfläche maximal und gehen oberhalb der Wolkenschichten auf Null zurück. Bei BOMEX weisen sie sowohl am Unterrand der Wolkenschicht ($z = 500$ m) als auch am Oberrand der feuchtlabilen Schicht ($z = 1500$ m) weitere lokale Maxima auf (Abb. 5.8a). Für DYCOMS stellt sich am Oberrand der Grenzschicht für UU und VV jeweils ein weiteres lokales Maximum

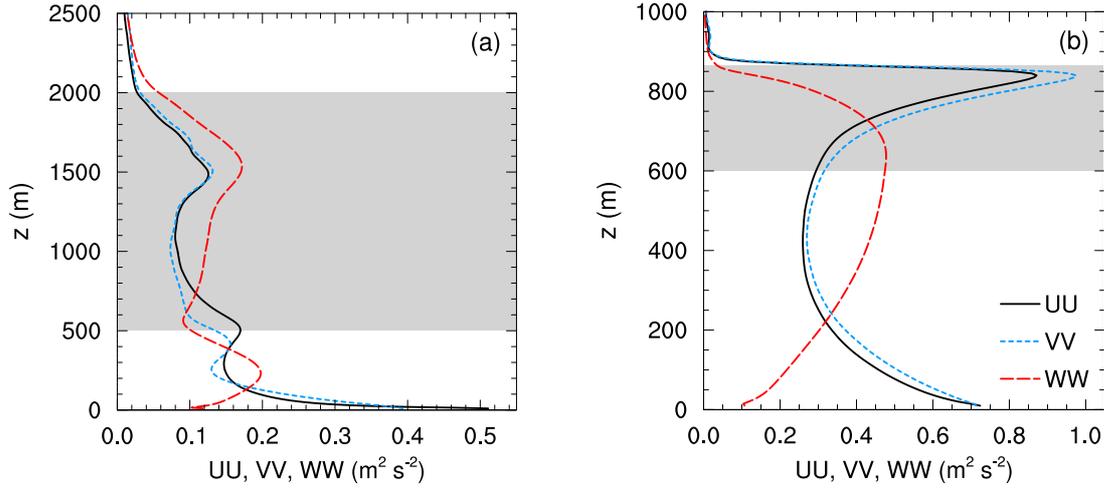


Abbildung 5.8: Vertikalprofile der horizontalen und vertikalen Geschwindigkeitsvarianzen $UU = \langle \bar{u}'^2 \rangle + \langle \tau_{11} \rangle$, $VV = \langle \bar{v}'^2 \rangle + \langle \tau_{22} \rangle$ und $WW = \langle \bar{w}'^2 \rangle + \langle \tau_{33} \rangle$ für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

ein, welches sogar noch höhere Werte als in der Nähe der Oberfläche aufweist (Abb. 5.8b). In diesen Bereichen mit weiteren maximalen horizontalen Varianzen treffen die in der konvektiven Grenzschicht hervorgerufenen Aufwinde auf stark stabile Schichten und werden seitlich abgelenkt. Die horizontalen Geschwindigkeitsvarianzen nehmen also auf Kosten der vertikalen Varianz $WW = \langle \bar{w}'^2 \rangle + \langle \tau_{33} \rangle$ zu. Die größten Fluktuationen der Vertikalgeschwindigkeit treten bei BOMEX in etwa der Mitte der trockenen Mischungsschicht und am Oberrand der feucht-labilen Schicht auf (Abb. 5.8a). Bei DYCOMS befindet sich das Maximum von WW im Bereich der unteren Wolkenschicht (Abb. 5.8b), wie bereits in Abschnitt 4.3.1 diskutiert wurde.

Da die Summe der Geschwindigkeitsvarianzen multipliziert mit $1/2$ die TKE ergibt (siehe Gl. 3.15), geben auch die Bilanzen der Varianzen Informationen darüber, in welchen Komponenten der TKE Produktion erfolgt und wie die Umverteilungsmechanismen genau funktionieren. Daher werden die Bilanzen der Geschwindigkeitsvarianzen mit Fokus auf den Zusammenhang zwischen TKE und ihren einzelnen Komponenten betrachtet. Dabei stellt $0.5 WW$ die vertikale Komponente und $0.5(UU+VV)$ die horizontale Komponente der TKE dar.

Die in Abb. 5.9a-d dargestellten mittleren Gradienten \mathcal{G}_{11} und \mathcal{G}_{22} sind bei beiden Grenzschichten in Oberflächennähe maximal und positiv. Sie führen also zu Produktion von horizontaler Varianz. Dabei ist \mathcal{G}_{11} bei BOMEX stärker ausgeprägt als \mathcal{G}_{22} , da die zonale Geschwindigkeitskomponente stärker als die meridionale ist. Bei DYCOMS sind die mittleren Gradienten der Bilanzen von UU und VV in derselben Größenordnung. Da $\mathcal{G}_{33} = 0$ und $\mathcal{S}_{\text{TKE}} = \mathcal{G}_{11} + \mathcal{G}_{22}$ gilt (vgl. Gln. 3.12 u. 3.16), wird TKE durch Scherung nur in den horizontalen Komponenten produziert. Auftrieb wiederum geht nur in die vertikale Komponente der TKE ein. Dabei führt Auftrieb vornehmlich zur Produktion von WW (Abb. 5.9e,f). Für den Auftriebsterm gilt $\mathcal{B}_{33} = 2\mathcal{B}_{\text{TKE}}$. Der Verlauf und die Bedeutung dieses Terms wurden bereits im vorherigen Abschnitt 5.2 diskutiert. Es bleibt festzuhalten, dass die Produktion von TKE durch Scherung in den horizontalen Varianzen erfolgt und durch Auftrieb vertikale Varianz produziert wird. Damit sind Scherung und Auftrieb also

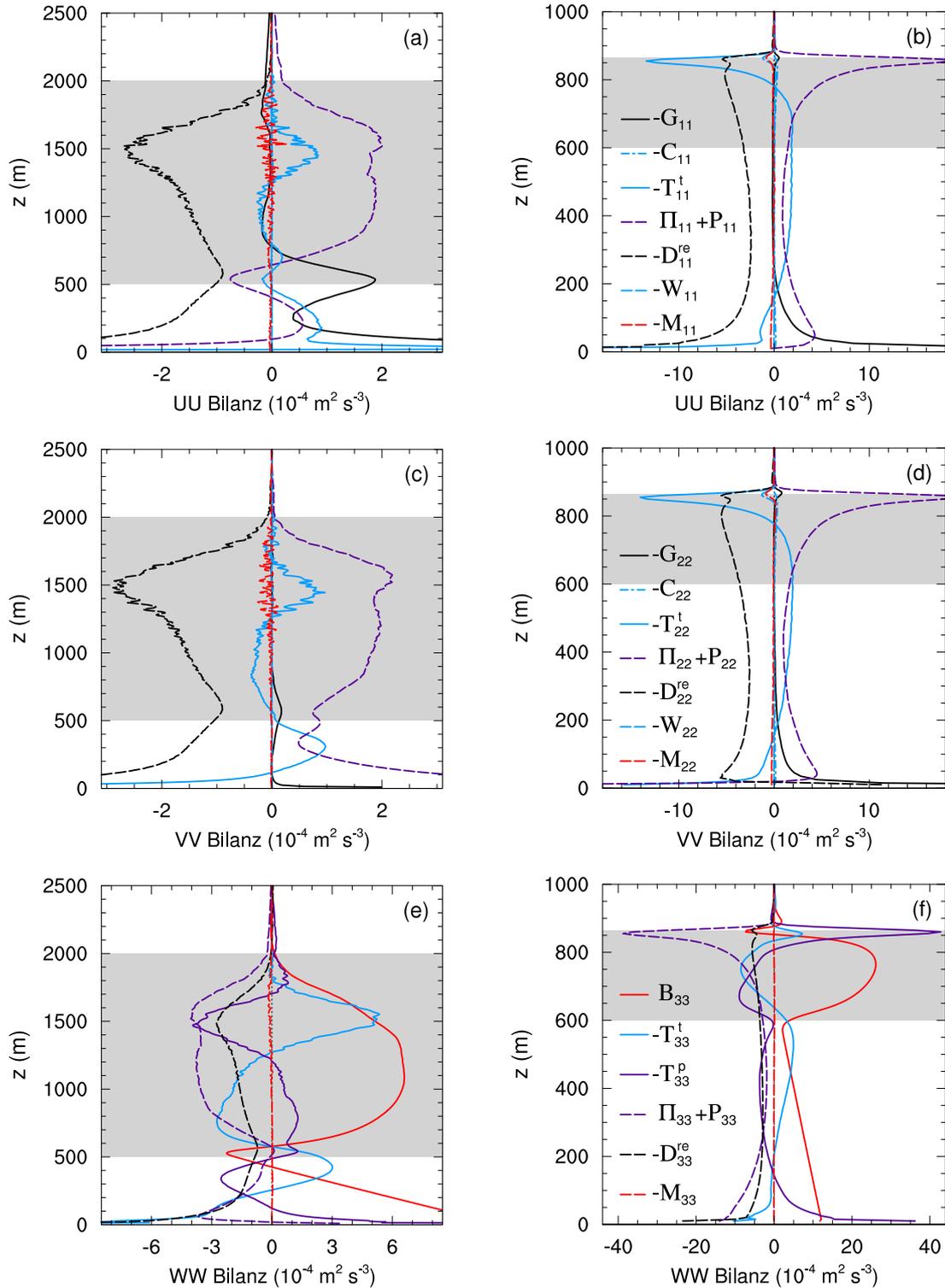


Abbildung 5.9: Vertikalprofile der Bilanzterme der zonalen Geschwindigkeitsvarianz UU für BOMEX (a) und DYCOMS (b), der meridionalen Geschwindigkeitsvarianz VV für BOMEX (c) und DYCOMS (d) und der vertikalen Geschwindigkeitsvarianz WW für BOMEX (e) und DYCOMS (f). Die Dissipationsraten D_{11}^{re} , D_{22}^{re} und D_{33}^{re} sind über die Residuenmethode bestimmt worden. Die Bezeichnung der übrigen Bilanzterme ist Gl. 3.12 zu entnehmen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

anisotrope Produktionsmechanismen von Turbulenz.

Ein Ausgleich der Anisotropie wird über die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen $\Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij}$ herbeigeführt. Wie in Abschnitt 3.1.1 beschrieben, verschwindet die Summe über alle drei Diagonalkomponenten von $\Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij}$ bei inkompressiblen Strömungen, sodass folglich $\Pi_{ij} + \mathcal{P}_{ij}$ nicht in der TKE-Bilanz (Gl. 3.16) auftaucht, wohl aber in den einzelnen Komponenten der TKE (Gl. 3.14). Dies wird auch in Abb. 5.9 deutlich. $\Pi_{11} + \mathcal{P}_{11}$ und $\Pi_{22} + \mathcal{P}_{22}$ sind bei BOMEX und DYCOMS über weite Teile der Grenzschicht positiv und $\Pi_{33} + \mathcal{P}_{33}$ negativ. Die Druck-Kovarianz führt also in den Bilanzen von UU und VV vornehmlich zu Produktion und in der Bilanz von WW zu Vernichtung von Varianz. Dies bedeutet, dass die durch Auftrieb in der vertikalen Komponente erzeugte TKE über die Druck-Kovarianzen in die horizontalen Komponenten transferiert wird. Über denselben Mechanismus wird die in den horizontalen Komponenten durch Scherung erzeugte TKE in die vertikale Komponente gebracht (z.B. CUIJPERS *et al.*, 1996).

Die Dissipationsraten in den Bilanzen der Geschwindigkeitsvarianzen sind mittels der in Abschnitt 5.1.2 beschriebenen Residuenmethode bestimmt worden, wonach die Dissipationsraten aus Umstellen von (3.12) gewonnen werden und in den einzelnen Komponenten

$$\mathcal{D}_{11}^{\text{re}} = -\mathcal{G}_{11} - \mathcal{C}_{11} - \mathcal{W}_{11} - \mathcal{T}_{11}^{\text{t}} + \Pi_{11} + \mathcal{P}_{11} - \mathcal{M}_{11}, \quad (5.4)$$

$$\mathcal{D}_{22}^{\text{re}} = -\mathcal{G}_{22} - \mathcal{C}_{22} - \mathcal{W}_{22} - \mathcal{T}_{22}^{\text{t}} + \Pi_{22} + \mathcal{P}_{22} - \mathcal{M}_{22}, \quad (5.5)$$

$$\mathcal{D}_{33}^{\text{re}} = \mathcal{B}_{33} - \mathcal{T}_{33}^{\text{t}} - \mathcal{T}_{33}^{\text{p}} + \Pi_{33} + \mathcal{P}_{33} - \mathcal{M}_{33} \quad (5.6)$$

lauten. Dissipation führt bei beiden untersuchten Fällen in den Bilanzen der drei Geschwindigkeitsvarianzen zu Vernichtung von Varianz. In den horizontalen Varianzen stellt Dissipation sowohl bei der Simulation von Kumulus als auch von Stratokumulus über weite Teile der Grenzschicht den hauptsächlichen Verlustterm dar (Abb. 5.9a-d). Bei der Bilanz von WW führt zusätzlich zur Dissipation auch die Druck-Kovarianz $\Pi_{33} + \mathcal{P}_{33}$ zu Vernichtung von vertikaler Geschwindigkeitsvarianz. Bei BOMEX sind beide Terme in derselben Größenordnung (Abb. 5.9e). Dies gilt außer in der oberen Hälfte der Stratokumulusschicht auch für DYCOMS (Abb. 5.9f). In der oberen Stratokumulusschicht dominiert allerdings die Druck-Kovarianz die Vernichtung von vertikaler Varianz. Diesen Unterschied im relativen Verhältnis von Druck-Kovarianz und Dissipation bei Kumulus- und Stratokumulusschichten beobachten auch GOLAZ *et al.* (2005). Sie führen aus, dass die Umverteilung durch die Druck-Kovarianz bei Anwesenheit von sehr starken Inversionen wie bei DYCOMS stärker ausfällt als bei schwächeren Inversionen wie bei BOMEX und somit die Druck-Kovarianz in solchen Fällen gegenüber der Dissipation dominiert. Dies wird auch an den sich aufgrund der Bilanz einstellenden Varianzen deutlich. Wenn die turbulenten Wirbel auf eine stark stabile Schicht treffen, werden sie seitlich abgelenkt, sodass vertikale Varianz in horizontale Varianzen transferiert wird. Dies ist bei DYCOMS deutlich stärker ausgeprägt als bei BOMEX (siehe Abb. 5.8), weil die abschließende Inversion deutlich stärker ausgeprägt ist.

Ein Vergleich der Dissipationsraten $\mathcal{D}_{11}^{\text{re}}$, $\mathcal{D}_{22}^{\text{re}}$ und $\mathcal{D}_{33}^{\text{re}}$ mit der Dissipationsrate $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ der TKE, die in Abb. 5.7 dargestellt ist, verdeutlicht, dass die Dissipationsraten in den Bilanzen der Varianzen proportional zu $\mathcal{D}_{\text{TKE}}^{\text{re}}$ sind. Die Proportionalitätskonstante ist etwa $2/3$. Dies entspricht den Erwartungen, da nach Gl. 3.12 $\mathcal{D}_{ij}^{\text{re}} = 2/3 \langle \epsilon \rangle$ ist. Folglich liefert die Residuenmethode mit der Theorie übereinstimmende Dissipationsraten. Lediglich das positive Vorzeichen von $\mathcal{D}_{22}^{\text{re}}$ in Oberflächennähe in Abb. 5.9d ist nicht physikalisch, da Dissipation immer zu Vernichtung von Varianz führt. Daher sind die oberflächennahen Bilanzterme nur bedingt belastbar.

Der turbulente Transport $\mathcal{T}_{11}^{\text{t}}$ und $\mathcal{T}_{22}^{\text{t}}$ ist bei BOMEX in den Bilanzen der horizontalen

Varianzen im Vergleich zur Dissipation und der Druck-Kovarianz von geringerer Bedeutung (Abb. 5.9a,c). Es findet Transport von der oberflächennahen Schicht in die darüber liegende Mischungsschicht und ebenso von der unteren Hälfte der Wolkenschicht in die obere Hälfte statt. Bei DYCOMS ist der Transport am oberen Rand der Grenzschicht eine große Senke und gleicht die Produktion durch die Druck-Kovarianz zu weiten Teilen alleine aus (Abb. 5.9b,d). In der Mitte der Grenzschicht sorgt er zusammen mit der Druck-Kovarianz für den Ausgleich des Verlusts durch Dissipation. Die Verläufe von \mathcal{T}_{11}^t und \mathcal{T}_{22}^t zeigen, dass die am Wolkenoberrand durch Strahlungsabkühlung erzeugte Varianz in untere Schichten transportiert wird.

Der Transport \mathcal{T}_{33}^t von vertikaler Varianz WW ist eine wichtige Größe zur Aufrechterhaltung der Bilanzen von BOMEX und DYCOMS (Abb. 5.9e,f). Insbesondere fällt beim Vergleich von \mathcal{T}_{33}^t mit dem turbulenten Transport $\mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ der TKE (Abb. 5.7) ins Auge, dass $\mathcal{T}_{33}^t \approx 2 \mathcal{T}_{\text{TKE}}^t$ gilt. Dies ist bei BOMEX in der gesamten Grenzschicht und bei DYCOMS für $z < 700$ m der Fall und bedeutet, dass der Transport von TKE durch den Transport der vertikalen Varianz dominiert wird. Diese Beobachtung ist in Einklang mit LES von Kumulus-bedeckten Grenzschichten von CUIJPERS *et al.* (1996) und Beobachtungen einer trockenen konvektiven Grenzschicht von LENSCHOW *et al.* (1980). Der Transport \mathcal{T}_{33}^p durch Druckfluktuationen ist bei BOMEX wie bei der TKE-Bilanz fast spiegelbildlich zum turbulenten Transport (Abb. 5.9e) und liefert bei DYCOMS die Hauptquelle für vertikale Varianz am Oberrand der Grenzschicht (Abb. 5.9f).

Die Einflüsse von Absinken \mathcal{W}_{11} und \mathcal{W}_{22} sowie Corioliskraft \mathcal{C}_{11} und \mathcal{C}_{22} sind vernachlässigbar. Auch die zeitlichen Änderungen \mathcal{M}_{11} , \mathcal{M}_{22} und \mathcal{M}_{33} sind klein, sodass es sich hier um stationäre Bilanzen handelt.

Die soeben vorgestellten Bilanzen der Geschwindigkeitsvarianzen von bewölkten Grenzschichten stimmen gut mit Ergebnissen von MOENG (1986); CUIJPERS *et al.* (1996); DE ROODE und BRETHERTON (2003) und GOLAZ *et al.* (2005) überein. An dieser Stelle soll festgehalten werden, dass die Bilanzen der horizontalen Geschwindigkeitsvarianzen sich vorwiegend aus einem Gleichgewicht von Scherungsproduktion, Dissipation, turbulentem Transport und Druck-Kovarianz zusammensetzen. Die Bilanz der vertikalen Varianz besteht aus einem Gleichgewicht von Auftriebsproduktion, turbulentem Transport und Transport durch Druckfluktuationen, Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz und Dissipation. Insbesondere die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz, welche die TKE zwischen den horizontalen und vertikalen Komponenten der TKE umverteilt und bestrebt ist, die Turbulenz in einen isotropen Zustand zurückzuführen, ist von Bedeutung. Sie ist über weite Bereiche der Grenzschicht maßgeblich für die Produktion von horizontaler Varianz und Vernichtung von vertikaler Varianz verantwortlich.

5.4 Bilanzen der Impulsflüsse

Die vertikalen und horizontalen Impulsflüsse für BOMEX und DYCOMS sind in Abb. 5.10 dargestellt. Dabei werden der zonale vertikale Impulsfluss mit $WU = \langle \overline{w''u''} \rangle + \langle \tau_{13} \rangle$, der meridionale vertikale Impulsfluss mit $WV = \langle \overline{w''v''} \rangle + \langle \tau_{23} \rangle$ und der horizontale Impulsfluss mit $UV = \langle \overline{u''v''} \rangle + \langle \tau_{12} \rangle$ abgekürzt. Da der Impulsflusstensor $\langle \overline{u''_i u''_j} \rangle + \langle \tau_{ij} \rangle$ symmetrisch ist, gilt $WU = UW$, $WV = VW$, $UV = VU$; folglich werden nur drei Komponenten dargestellt. Bei BOMEX nehmen die vertikalen Impulsflüsse in der trockenen Mischungsschicht ($z < 500$ m) linear mit der Höhe ab und sind im oberen Bereich der Wolkenschicht nahe Null (Abb. 5.10a). WU ist in der Mischungsschicht deutlich größer als WV . Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei BOMEX der Grenzschichtwind hauptsächlich aus zonal-

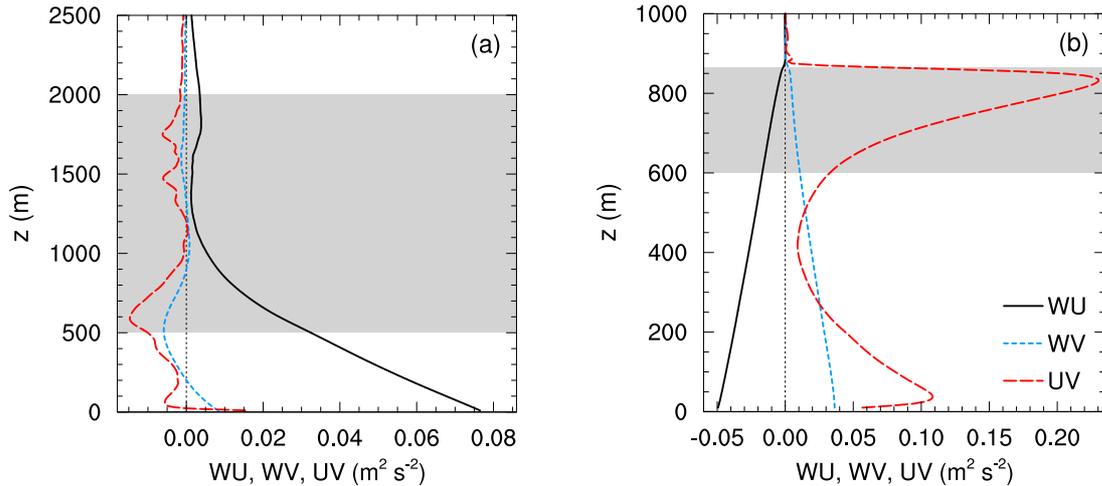


Abbildung 5.10: Vertikalprofile der vertikalen und horizontalen Impulsflüsse $WU = \langle \overline{w''\overline{u}''} \rangle + \langle \tau_{13} \rangle$, $WV = \langle \overline{w''\overline{v}''} \rangle + \langle \tau_{23} \rangle$ und $UV = \langle \overline{u''\overline{v}''} \rangle + \langle \tau_{12} \rangle$ für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

ler Richtung weht (siehe auch Abb. 4.2d,e) und demnach auch der vertikale Transport von zonalem Impuls gegenüber dem meridionalen Impuls dominiert. Bei DYCOMS zeigen die vertikalen Impulsflüsse über die gesamte Grenzschicht einen nahezu linearen Verlauf (Abb. 5.10b), welches den gut durchmischten Zustand der Grenzschicht verdeutlicht. Die Stärke von WU und WV ist vergleichbar, wobei WU aufgrund einer positiven zonalen Windgeschwindigkeit negativ ist. Der horizontale Impulsfluss UV ist bei BOMEX in derselben Größenordnung wie der meridionale, vertikale Impulsfluss WV. Bei DYCOMS ist UV deutlich stärker ausgeprägt als die vertikalen Impulsflüsse (Abb. 5.10). UV stellt sich bei einer horizontal homogenen Grenzschicht aus Kontinuitätsgründen ein. Die für eine horizontal homogene Grenzschicht entscheidenden Größen sind allerdings die vertikalen Flüsse, da aus ihrem Verlauf und ihrer Änderung mit der Höhe auf die in der Grenzschicht stattfindenden Prozesse geschlossen werden kann. Daher sind die horizontalen Flüsse und dementsprechend auch ihre Bilanzen von untergeordneter Bedeutung, sodass im Folgenden der Fokus auf die Untersuchung der Bilanzen der vertikalen Flüsse gelegt wird.

Bei der Interpretation der Bilanzterme von WU und WV, die in Abb. 5.11 dargestellt werden, ist darauf zu achten, dass bei der Bilanz von WU im Fall von DYCOMS (Abb. 5.11b) ein positiver Bilanzterm in einer Höhe eine Senke darstellt und ein negativer Term ein Quellterm ist. Dies ist damit verbunden, dass WU bei DYCOMS negativ ist (siehe Abb. 5.10b). In den übrigen Teilabbildungen von Abb. 5.11, also a, c und d, stellen positive Terme Produktion und negative Terme Vernichtung des Flusses dar.

Bei einem Blick auf Abb. 5.11 fällt ins Auge, dass die Bilanzterme von WU und WV bei BOMEX innerhalb der Wolkenschicht stark schwanken. Dies wurde bereits in Abschnitt 4.2.2 dargelegt und ist darauf zurückzuführen, dass für die Bilanzterme der Impulsflüsse eine größere Datenbasis erforderlich ist, um glatte Momente zu erhalten (LENSCHOW und STANKOV, 1986). Bei der Bilanz von WV (Abb. 5.11b) ist oberhalb von 1000 m keine Auswertung möglich, da alle Bilanzterme mit der Höhe stark schwanken und dort der meridionale Impulsfluss zu klein ist, um eine aussagekräftige Bilanz ableiten zu können. Bei BOMEX und DYCOMS wird in Abb. 5.11 der Wolkenbereich jeweils vergrößert.

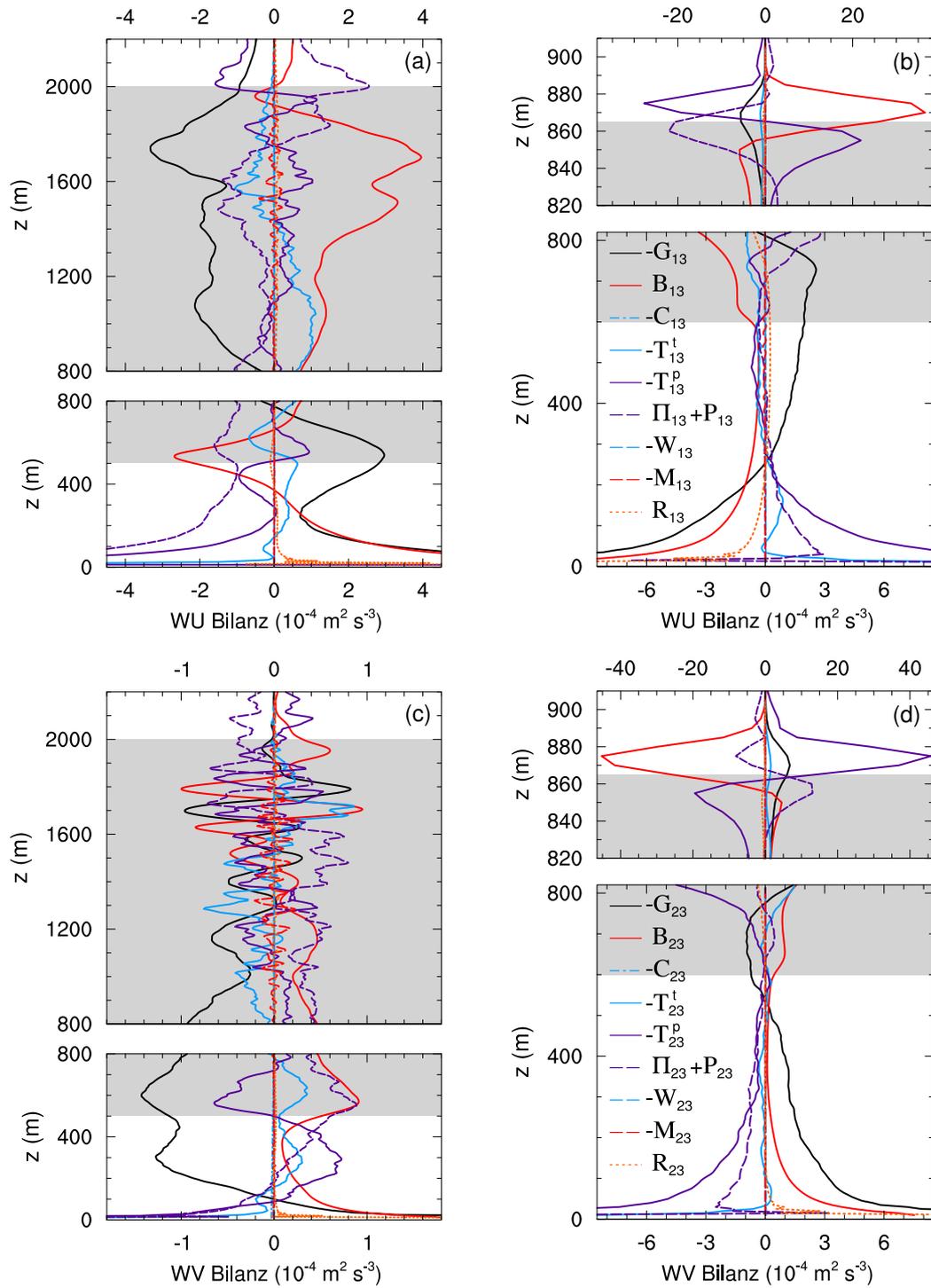


Abbildung 5.11: Vertikalprofile der Bilanzterme des zonalen vertikalen Impulsflusses WU für BOMEX (a) und DYCOMS (b) und des meridionalen vertikalen Impulsflusses WV für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Bezeichnung der Bilanzterme ist Gl. 3.12 zu entnehmen. Da WV bei DYCOMS negativ ist, sind negative Terme in (b) Produktionsterme und positive Terme Verlustterme. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In (b) und (d) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

bert dargestellt, da sich vor allem bei DYCOMS am Oberrand der Stratokumuluschicht starke Gradienten von Temperatur und Feuchte befinden, die eine Vergrößerung notwendig machen. Bei DYCOMS (Abb. 5.11b,d) ändert sich außerdem die Skalierung der Abszisse für den oberen Bereich der Grenzschicht, da die Bilanzterme dort wesentlich stärker ausgeprägt sind als in der restlichen Grenzschicht.

Sowohl bei der Kumulus- als auch bei der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht führen Scherung \mathcal{G}_{13} , \mathcal{G}_{23} und Auftrieb \mathcal{B}_{13} , \mathcal{B}_{23} im unteren Bereich der Grenzschicht, welches $z < 200$ m für BOMEX bzw. $z < 400$ m für DYCOMS bedeutet, zur Produktion von WU und WV (Abb. 5.11). Diese Produktion wird über ein Zusammenspiel aus Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz $\Pi_{13} + \mathcal{P}_{13}$, $\Pi_{23} + \mathcal{P}_{23}$ und Transport \mathcal{T}_{13}^p , \mathcal{T}_{23}^p durch Druckfluktuationen ausgeglichen. Oberhalb von ca. 200 m wirken Scherung und Auftrieb bei BOMEX allerdings nicht mehr miteinander sondern gegeneinander (Abb. 5.11a,c). In diesem Bereich steht der Einfluss von Scherung einer Kombination aus Auftrieb, Druck-Kovarianz und Druck-Transport gegenüber. Am Oberrand der trockenen Mischungsschicht ($z = 500$ m) wird die Scherungsproduktion hauptsächlich durch den Auftriebsterm ausgeglichen. Über den größten Teil der Wolkenschicht wird Auftrieb allerdings wieder zum Quellterm und Scherung zum Verlustterm, welcher den Impulsfluss vernichtet. Bei DYCOMS sind die Bilanzterme von WU und WV im mittleren Teil der Grenzschicht, für $400 \text{ m} < z < 800 \text{ m}$, kleiner als unter- und oberhalb, weil dort gute Durchmischung herrscht (Abb. 5.11b,d). In diesem Bereich wird der Scherungsterm wie bei BOMEX durch das Zusammenwirken von Auftrieb, Druck-Kovarianz und Druck-Transport wett gemacht. Am Grenzschichtoberrand, wo die Bilanzterme aufgrund der dort herrschenden starken Gradienten maximal werden, steht der Vernichtung von vertikalem Impulsfluss durch Auftrieb sowohl die Druck-Kovarianz als auch der Druck-Transport gegenüber.

Der turbulente Transport \mathcal{T}_{13}^t , \mathcal{T}_{23}^t ist bei den Bilanzen der vertikalen Impulsflüsse von viel geringerer Bedeutung als bspw. bei der Bilanz der TKE (siehe auch Abb. 5.7). Die Einflüsse von Corioliskraft \mathcal{C}_{13} , \mathcal{C}_{23} und Absinken \mathcal{W}_{13} , \mathcal{W}_{23} sowie die zeitlichen Änderungen \mathcal{M}_{13} , \mathcal{M}_{23} spielen zur Aufrechterhaltung der Bilanzen keine Rolle. Die in Abb. 5.11 dargestellten Residuen

$$\mathcal{R}_{13} = -\mathcal{G}_{13} + \mathcal{B}_{13} - \mathcal{C}_{13} - \mathcal{T}_{13}^t - \mathcal{T}_{13}^p + \Pi_{13} + \mathcal{P}_{13} - \mathcal{W}_{13} - \mathcal{M}_{13}, \quad (5.7)$$

$$\mathcal{R}_{23} = -\mathcal{G}_{23} + \mathcal{B}_{23} - \mathcal{C}_{23} - \mathcal{T}_{23}^t - \mathcal{T}_{23}^p + \Pi_{23} + \mathcal{P}_{23} - \mathcal{W}_{23} - \mathcal{M}_{23} \quad (5.8)$$

sind außer in Oberflächennähe in der gesamten Grenzschicht verschwindend gering. Auch Nahe der Oberfläche, dem bei LES mit größeren Unsicherheiten behafteten Bereich, sind die Residuen kleiner als die Terme führender Ordnung. Daraus folgt, dass die Bilanzen sehr gut geschlossen werden können.

Die von BROST *et al.* (1982) aus Messungen in Stratokumulus-bedeckten Grenzschichten abgeleiteten Bilanzen von WU und WV zeigen in Übereinstimmung mit den hier erzielten Ergebnissen, dass der Scherungsterm über weite Teile der Grenzschicht dominiert und Vernichtung von vertikalem Impulsfluss durch Auftrieb am Oberrand der Grenzschicht von Bedeutung ist. Sie verdeutlichen auch, dass der turbulente Transport gering ausfällt. Die bei THERRY und LACARRERE (1983) gezeigten Verläufe der einzelnen Bilanzterme von WU und WV, die aus einem Grenzschichtmodell dritter Ordnung für konvektive Grenzschichten abgeleitet wurden, zeigen, dass die wesentlichen Bilanzterme aufgrund von Scherung, Auftrieb, Druck-Transport und Druck-Kovarianz am Grenzschichtoberrand extremal werden. Dies stimmt mit den in Abb. 5.11 gezeigten Verläufen überein. Die bei WYNGAARD (2010, S. 250) aufgezeigten Resultate, dass bei den Bilanzen von WU und WV Scherung den wesentlichen Quellterm und Druck-Kovarianz und Druck-Transport die

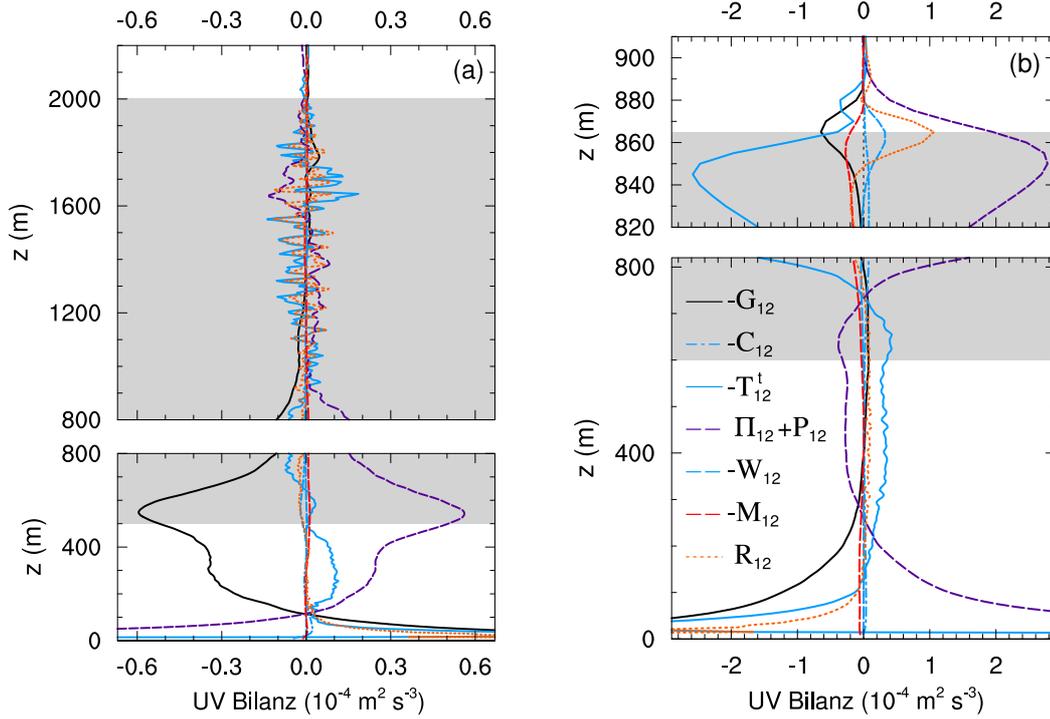


Abbildung 5.12: Vertikalprofile der Bilanzterme des horizontalen Impulsflusses UV für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Die Bezeichnung der Bilanzterme ist Gl. 3.12 zu entnehmen. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

wesentlichen Verlustterme darstellen, ist im Einklang mit den hier gezeigten Ergebnissen und stellt damit eine Kurzzusammenfassung der Bilanzen der vertikalen Impulsflüsse dar.

Die Bilanzterme des horizontalen Impulsflusses UV sind Abb. 5.12 zu entnehmen. Im Gegensatz zu WU und WV, kann UV nicht durch Auftrieb erzeugt oder vernichtet werden, da $\mathcal{B}_{12} = 0$ gilt (vgl. Gl. 3.12). Folglich bleibt als wesentlicher Produktionsmechanismus von UV nur die Scherung \mathcal{G}_{12} , die bei BOMEX mit der Druck-Kovarianz $\Pi_{12} + \mathcal{P}_{12}$, die nahezu spiegelbildlich zu \mathcal{G}_{12} ist, im Gleichgewicht steht (Abb. 5.12a). Turbulenter Transport \mathcal{T}_{12}^t ist, außer nahe der Oberfläche, von untergeordneter Bedeutung. Im größten Teil der Wolkenschicht sind die Bilanzterme relativ klein und von einem stark schwankenden Verlauf des Transportterms gekennzeichnet. Hier kann keine Aussage über die Bilanz getroffen werden. Bei DYCOMS kann für $z < 300$ m wie bei BOMEX ein Gleichgewicht von Scherung und Druck-Kovarianz festgestellt werden (Abb. 5.12b). Oberhalb von 300 m wird der Scherungseinfluss geringer und Druck-Kovarianz und turbulenter Transport gleichen sich gegenseitig aus. Insbesondere im oberen Bereich der Stratokumulusschicht wird die Druck-Kovarianz zum Quellterm, welchem Scherung und turbulenter Transport gegenüberstehen. Hieran wird die ausgleichende Wirkung der Druck-Kovarianz deutlich. $\Pi_{12} + \mathcal{P}_{12}$ sorgt dafür, dass die durch Scherung am Wolkenoberrand erzeugten vertikalen Impulsflüsse in die horizontale Komponente umverteilt werden. Die Einflüsse von Corioliskraft \mathcal{C}_{12} , Absinken \mathcal{W}_{12} und zeitlicher Änderung \mathcal{M}_{12} sind bei BOMEX und DYCOMS gering. Auch das Residuum $\mathcal{R}_{12} = -\mathcal{G}_{12} - \mathcal{C}_{12} - \mathcal{T}_{12}^t + \Pi_{12} + \mathcal{P}_{12} - \mathcal{W}_{12} - \mathcal{M}_{12}$ ist im Vergleich zu den Termen mit der größten Bedeutung klein und nur bei DYCOMS am Grenzschichtoberrand signifikant.

5.5 Bilanzen der skalaren Flüsse

Der vertikale Fluss $WT = \langle \bar{w}'\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 3} \rangle$ der potentiellen Flüssigwassertemperatur nimmt bei BOMEX und DYCOMS innerhalb der trockenen Mischungsschicht linear mit der Höhe ab (Abb. 5.13a,b). Dort ist der Flüssigwassergehalt $\bar{q}_1 = 0$, und nach Definition von $\bar{\theta}_1$ (siehe Gl. 2.13) reduziert sich WT zum fühlbaren Wärmestrom $\langle \bar{w}'\bar{\theta}'' \rangle + \langle \bar{w}'\bar{\theta}' \rangle$. Die lineare Abnahme ist also ein Indikator für den gut durchmischten Zustand der trockenen Grenzschicht. Innerhalb der Kumulus- und der Stratokumuluschicht wird WT durch das Vorhandensein von Bewölkung modifiziert, sodass sich ein überwiegend abwärts gerichteter Fluss von potentieller Flüssigwassertemperatur einstellt. Die Höhenkonstanz vom vertikalen Fluss $WQ = \langle \bar{w}'\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q 3} \rangle$ des Gesamtwassergehalts bis in die Mitte der Wolkenschichten verdeutlicht (Abb. 5.13c,d), dass die an der Ozeanoberfläche aufgenommene Feuchte bis in den oberen Bereich der Wolkenschichten gelangt. Die horizontalen Flüsse $UT = \langle \bar{u}'\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 1} \rangle$ und $VT = \langle \bar{v}'\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 2} \rangle$ der Flüssigwassertemperatur bzw. $UQ = \langle \bar{u}'\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q 1} \rangle$ und $VQ = \langle \bar{v}'\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q 2} \rangle$ des Gesamtwassergehalts stellen sich wie der horizontale Impulsfluss (siehe Abschnitt 5.4) in einer horizontal homogenen Grenzschicht aus Kontinuitätsgründen ein und sind von eher untergeordneter Bedeutung. Bei BOMEX sind die zonalen Flüsse UT und UQ (Abb. 5.13a,c) stärker ausgeprägt als die meridionalen Flüsse VT und VQ. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass bei BOMEX die zonale Geschwindigkeitskomponente größer als die meridionale ist und damit auch der Transport von Temperatur in zonaler Richtung größer ist. Bei der Stratokumulusbedeckten Grenzschicht weisen die horizontalen skalaren Flüsse einen nahezu spiegelbildlichen Verlauf zueinander auf (Abb. 5.13b,d). Bei DYCOMS sind UT und VT am Wolkenoberrand aufgrund der starken Inversion um fast zwei Größenordnungen größer als unterhalb. Da dies auch für alle anderen skalaren Flüsse gilt, wird für die Abszisse in Abb. 5.13b,d für den oberen und den unteren Teil der Grenzschicht eine unterschiedliche Skalierung gewählt.

Die Bilanzterme von WT, die in Abb. 5.14a,b dargestellt sind, sind zum einen in Nähe der Oberfläche und zum anderen im Inversionsbereich maximal. Dies entspricht den Bereichen, in denen jeweils ein großer Temperaturgradient auftritt. Verglichen mit der Inversionsschicht sind die Bilanzterme in der trockenen Mischungsschicht und in den unteren Wolkenschichten um eine (BOMEX) bzw. drei (DYCOMS) Größenordnungen kleiner, weshalb verschiedene Skalierungen in Abb. 5.14 gewählt werden. Der mittlere Gradiententerm $\mathcal{G}_{\theta 3}^{\theta}$, der proportional zum Produkt aus Varianz der Vertikalgeschwindigkeit und dem Gradienten der mittleren Temperatur ist (siehe Gl. 3.17), wechselt dort sein Vorzeichen, wo $\partial \langle \bar{\theta}_1 \rangle / \partial z$ jeweils das Vorzeichen wechselt. $\mathcal{G}_{\theta 3}^{\theta}$ führt in der Nähe der Oberfläche zur Produktion von positivem WT und in der Kumuluschicht bzw. am Oberrand der Stratokumuluschicht zu Produktion von negativem, also abwärts gerichtetem WT (Abb. 5.14a,b). Der Auftriebsterm $\mathcal{B}_{\theta 3}$ ist bei BOMEX und DYCOMS über die gesamte Grenzschicht positiv und damit bestrebt, den Betrag von WT zu erhöhen. Somit trägt er in der Nähe der Oberfläche zur Erzeugung von WT bei. Am Oberrand der Wolkenschichten und im Inversionsbereich wird der dort herrschende abwärtsgerichtete Fluss durch $\mathcal{B}_{\theta 3}$ weniger negativ, sodass der Auftriebsterm dort letztlich eine Senke für WT darstellt. Bei BOMEX und DYCOMS ist die Druck-Skalar-Kovarianz $\Pi_{\theta 3} + \mathcal{P}_{\theta 3}$ über die gesamte Grenzschicht nahezu spiegelbildlich zum Auftriebsterm $\mathcal{B}_{\theta 3}$. Dieser Zusammenhang hat weitreichende Konsequenzen für die Parametrisierung der Druck-Kovarianz im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung und wird in Kap. 6 weiter ausgeführt. Der Transport $\mathcal{T}_{\theta 3}$ von WT ist für die Aufrechterhaltung der Bilanz bei BOMEX und DYCOMS von untergeordneter Bedeu-

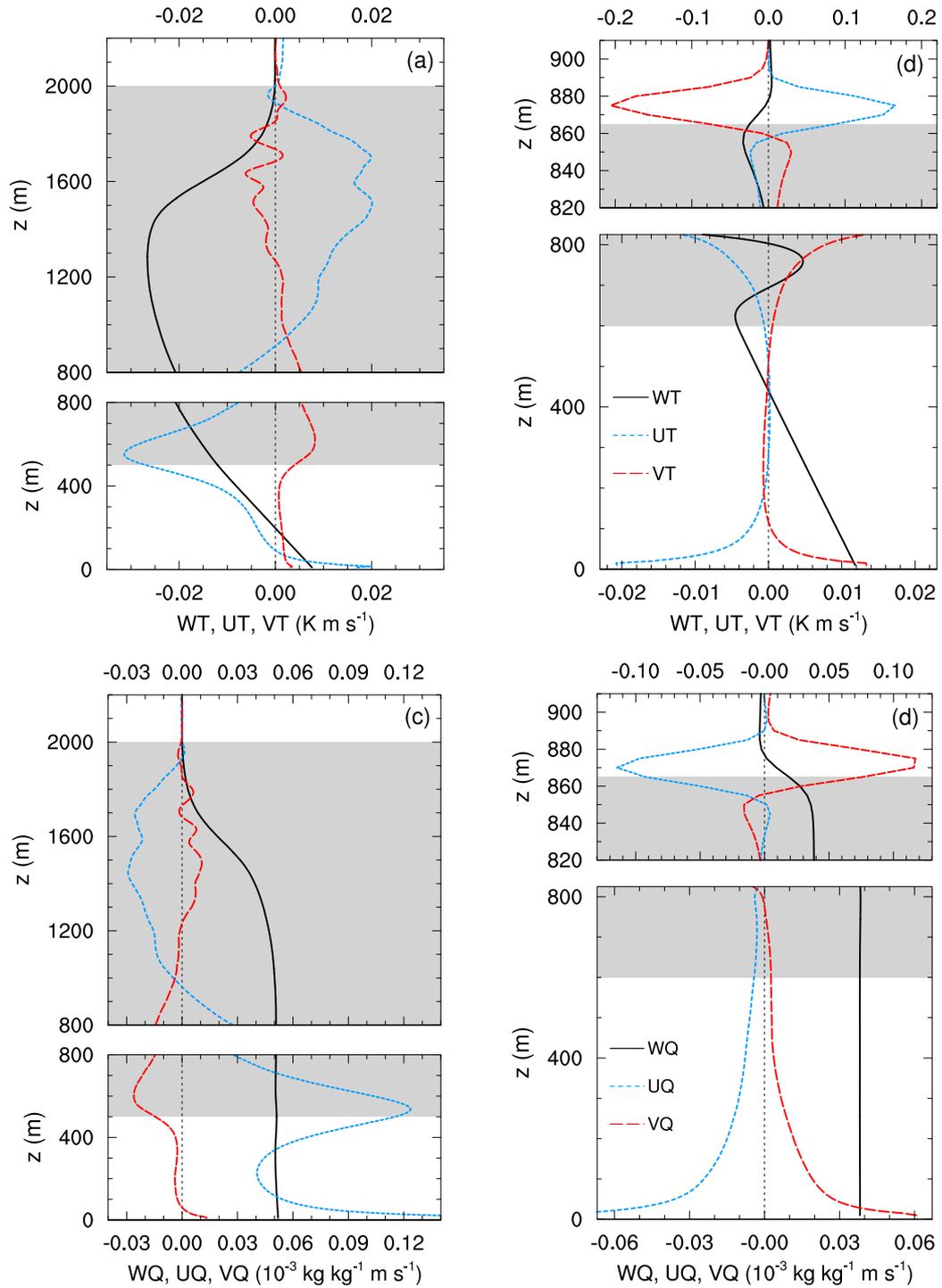


Abbildung 5.13: Vertikalprofile der vertikalen und horizontalen Flüsse $WT = \langle \bar{w}''\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 3} \rangle$, $UT = \langle \bar{u}''\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 1} \rangle$ und $VT = \langle \bar{v}''\bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta 2} \rangle$ der potentiellen Flüssigwassertemperatur für BOMEX (a) und DYCOMS (b) und der vertikalen und horizontalen Flüsse $WQ = \langle \bar{w}''\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q 3} \rangle$, $UQ = \langle \bar{u}''\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q 1} \rangle$ und $VQ = \langle \bar{v}''\bar{q}'' \rangle + \langle \tau_{q 2} \rangle$ des Gesamtwassergehalts für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. In (b) und (d) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

tung und hat lediglich bei DYCOMS zwischen 600 m und 800 m durch Kompensation der Produktion $\mathcal{G}_{\theta 3}^{\theta}$ durch den mittleren Gradienten eine größere Bedeutung. Der Strahlungsterm $\mathcal{Q}_{\theta 3}$ ist bei BOMEX Null, weil Strahlungsabkühlung über ein zeitlich invariantes Profil einfließt (siehe Abschnitt 4.2.1). Bei DYCOMS ist $\mathcal{Q}_{\theta 3}$ von geringer Bedeutung (Abb. 5.14b).

Die Bilanz von WQ (Abb. 5.14c,d) wird durch dieselben Terme wie die Bilanz von WT dominiert. Im Vergleich zur Bilanz von WT, ist der mittlere Gradiententerm $\mathcal{G}_{q 3}^q$ sowohl in Nähe der Oberfläche als auch am Wolkenoberrand, den Bereichen mit großen Gradienten der Feuchte, positiv. Dies hängt damit zusammen, dass der Gesamtwassergehalt $\langle \bar{q} \rangle$ bei BOMEX und DYCOMS kontinuierlich mit der Höhe abnimmt (siehe Abb. 4.2b bzw. 4.7b) und somit der Gradient von $\langle \bar{q} \rangle$ das Vorzeichen nicht wechselt. Durch $\mathcal{G}_{q 3}^q$ wird WQ also produziert. Allerdings wechselt bei der Bilanz von WQ im Gegensatz zur Bilanz von WT der Auftriebsterm $\mathcal{B}_{q 3}$ sein Vorzeichen. Dieser Term ist über weite Teile der trockenen Grenzschicht (Abb. 5.14c) bzw. bis in die Mitte der Stratokumuluschicht (Abb. 5.14d) positiv. Auftrieb erzeugt also in diesen Bereichen WQ und wird oberhalb dieser Bereiche wie bei der Bilanz von WT zu einem Verlustterm. Auch bei der Bilanz von WQ wird die Spiegelbildlichkeit von Auftriebsterm und Druck-Kovarianz ersichtlich.

Der wesentliche Unterschied in den Bilanzen der vertikalen, skalaren Flüsse von BOMEX und DYCOMS liegt im relativen Verhältnis von Auftriebsterm und Druck-Kovarianz am Oberrand der Wolkenschichten. Bei BOMEX sind Auftriebsterm und Druck-Kovarianz nahezu gleich groß, wohingegen bei DYCOMS die Druck-Kovarianz deutlich stärker ausgeprägt ist.

Die zeitlichen Änderungen $\mathcal{M}_{\theta 3}$, $\mathcal{M}_{q 3}$ und der Einfluss von großräumigem Absinken $\mathcal{W}_{\theta 3}$, $\mathcal{W}_{q 3}$ sind vernachlässigbar. In dem in PALM verwendeten Koordinatensystem gilt $\mathcal{C}_{\theta 3} = 0$ und $\mathcal{C}_{q 3} = 0$ (siehe Gln. 3.17 u. 3.18). Die Residuen $\mathcal{R}_{\theta 3}$ und $\mathcal{R}_{q 3}$, die mittels

$$\mathcal{R}_{\theta 3} = -\mathcal{G}_{\theta 3}^{\theta} + \mathcal{B}_{\theta 3} - \mathcal{T}_{\theta 3} - \Pi_{\theta 3} - \mathcal{P}_{\theta 3} + \mathcal{Q}_{\theta 3} - \mathcal{W}_{\theta 3} - \mathcal{M}_{\theta 3}, \quad (5.9)$$

$$\mathcal{R}_{q 3} = -\mathcal{G}_{q 3}^q + \mathcal{B}_{q 3} - \mathcal{T}_{q 3} - \Pi_{q 3} - \mathcal{P}_{q 3} - \mathcal{W}_{q 3} - \mathcal{M}_{q 3} \quad (5.10)$$

bestimmt werden, sind für BOMEX gering und auch bei DYCOMS kleiner als die Terme führender Ordnung (Abb. 5.14). Allerdings stellt sich bei DYCOMS am Grenzschichtoberrand ein Residuum ein, das in der Größenordnung des mittleren Gradiententerms liegt und einen spiegelbildlichen Verlauf dazu aufweist. Die für DYCOMS durchgeführte Gitterweitenstudie (siehe Abschnitt 4.3.2) zeigte auf, dass die Residuen bei kleiner werdender Gitterweite abnehmen und die Gradiententerme zunehmen. Dies deutet darauf hin, dass selbst bei einer vertikalen Gitterweite von 5 m, wie sie für die Auswertung der Bilanzen verwendet wird, die starken Temperatur- und Feuchtesprünge von DYCOMS nicht genügend aufgelöst werden können. Somit sind die mittleren Gradiententerme am Grenzschichtoberrand zu klein und maßgeblich für das Residuum verantwortlich.

Die in CUIJPERS *et al.* (1996) und MOENG (1986) ausführlich diskutierten Bilanzterme von WT und WQ für Grenzschichten mit Kumulus- und Stratokumulusbewölkung stimmen vom Verlauf und dem relativen Verhältnis zueinander sehr gut mit den soeben diskutierten Bilanztermen für BOMEX und DYCOMS überein. Die Spiegelbildlichkeit von Auftriebsterm und Druck-Kovarianz wird in beiden Arbeiten betont und ist auch bei BOMEX und DYCOMS deutlich ausgeprägt.

Die Bilanzen der zonalen skalaren Flüsse UT und UQ werden in Abb. 5.15a-d dargestellt. Im Gegensatz zu den vertikalen Flüssen, gibt es bei UT und UQ keine Produktion durch Auftrieb, da $\mathcal{B}_{\theta 1} = \mathcal{B}_{q 1} = 0$ gilt (siehe Gln. 3.17 u. 3.18). Dafür stellt sich aber zusätzlich zum mittleren Gradiententerm $\mathcal{G}_{\theta 1}^{\theta}$ bzw. $\mathcal{G}_{q 1}^q$ noch ein weiterer Gradiententerm $\mathcal{G}_{\theta 1}^u$ bzw. $\mathcal{G}_{q 1}^u$ ein, der proportional zum Gradienten der mittleren Geschwindigkeit ist und damit horizontalen Fluss durch Scherung erzeugt. Bei BOMEX und DYCOMS stellt sich bei den Bilanzen von

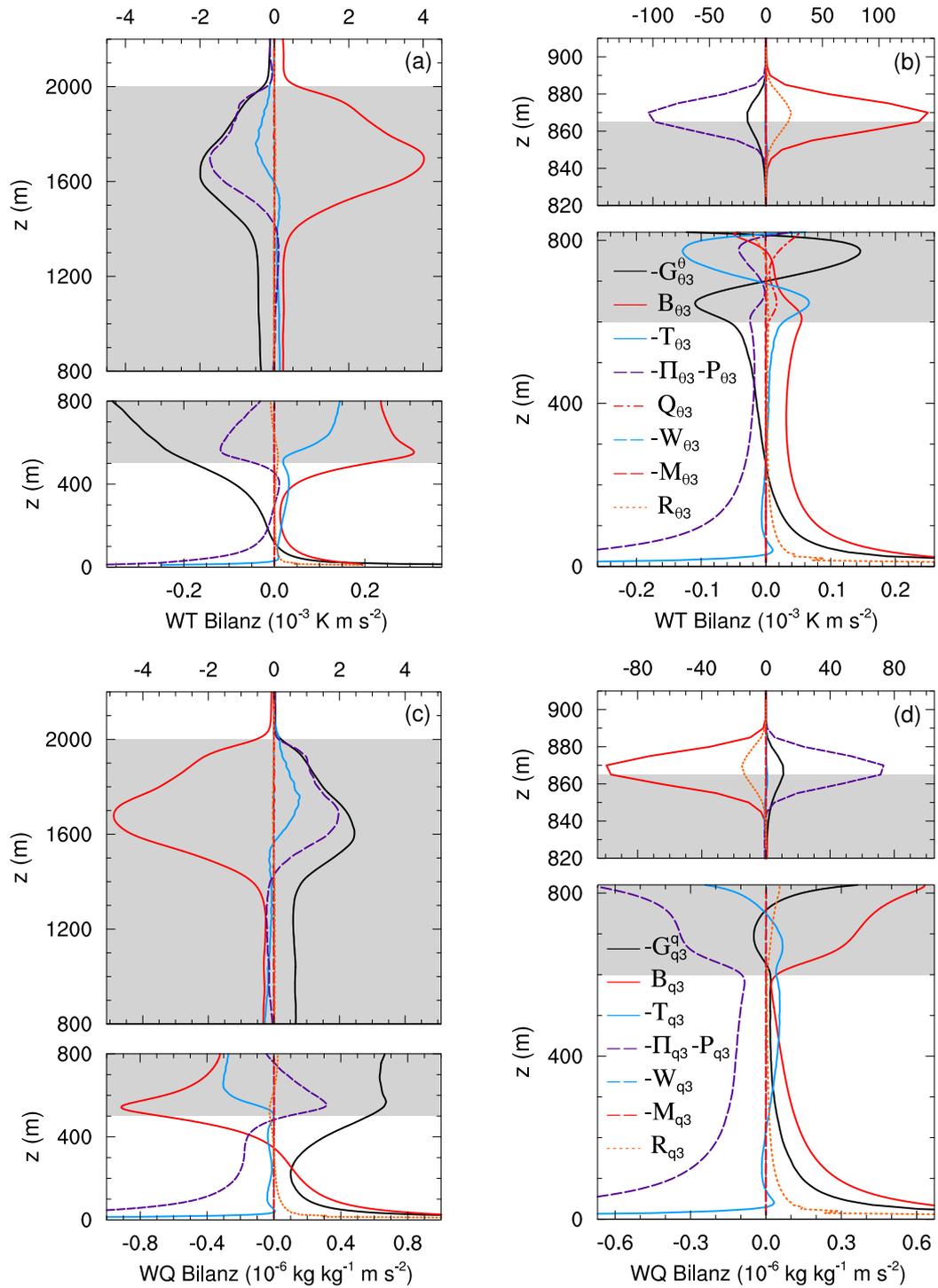


Abbildung 5.14: Vertikalprofile der Bilanzterme des vertikalen Flusses WT der potentiellen Flüssigwassertemperatur für BOMEX (a) und DYCOMS (b) und des vertikalen Flusses WQ des Gesamtwassergehalts für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Bezeichnung der Bilanzterme von WT ist Gl. 3.17 und die von WQ ist Gl. 3.18 zu entnehmen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In allen Teilabbildungen unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenregionen gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

UT und UQ ein prinzipielles Gleichgewicht zwischen Produktion der Flüsse durch die mittleren Gradienten und Vernichtung durch die Druck-Kovarianz ein (Abb. 5.15). Bei DYCOMS ist der Transport $\mathcal{T}_{\theta 1}$ von UT bzw. $\mathcal{T}_{q 1}$ von UQ, der die am Grenzschichtober- rand produzierten Flüsse in die Mitte der Grenzschicht bringt, im mittleren Bereich der Grenzschicht ein signifikanter Quellterm (Abb. 5.15b,d). Bei BOMEX zeigt der Trans- portterm einen schwankenden Verlauf innerhalb der Wolkenschicht und auch die zeitlichen Änderungen $\mathcal{M}_{\theta 1}$, $\mathcal{M}_{q 1}$ sind dort von Bedeutung (Abb. 5.15a,c). Wie im vorherigen Ab- schnitt 5.4 für den horizontalen Impulsfluss gezeigt wurde, ist auch für die Bilanzterme der horizontalen Flüsse die statistische Basis zu klein, um glattere Profile zu erhalten. Den- noch zeigt sich in diesem Bereich, dass Transport ein wesentlicher Mechanismus ist, der die Produktion ausgleicht. Einfluss von Corioliskraft $\mathcal{C}_{\theta 1}$, $\mathcal{C}_{q 1}$ sowie großräumigem Absinken $\mathcal{W}_{\theta 1}$ und $\mathcal{W}_{q 1}$ sind vernachlässigbar. Auch die zeitlichen Änderungen $\mathcal{M}_{\theta 1}$ und $\mathcal{M}_{q 1}$ sind bei DYCOMS gering und bei BOMEX lediglich in der oberen Wolkenschicht von etwas größerer Bedeutung. Die Residuen

$$\mathcal{R}_{\theta 1} = -\mathcal{G}_{\theta 1}^{\theta} - \mathcal{G}_{\theta 1}^u - \mathcal{C}_{\theta 1} - \mathcal{T}_{\theta 1} - \Pi_{\theta 1} - \mathcal{P}_{\theta 1} + \mathcal{Q}_{\theta 1} - \mathcal{W}_{\theta 1} - \mathcal{M}_{\theta 1}, \quad (5.11)$$

$$\mathcal{R}_{q 1} = -\mathcal{G}_{q 1}^q - \mathcal{G}_{q 1}^u - \mathcal{C}_{q 1} - \mathcal{T}_{q 1} - \Pi_{q 1} - \mathcal{P}_{q 1} - \mathcal{W}_{q 1} - \mathcal{M}_{q 1} \quad (5.12)$$

sind wie bei den Bilanzen von WT und WQ über weite Teile der Grenzschicht klein (Abb. 5.15). Bei DYCOMS stellt sich am Grenzschichtoberrand ein großes Residuum ein, welches wie bei den Bilanzen von WT und WQ auf die unzureichende Auflösung der großen skalen Gradienten zurückzuführen ist.

Die Bilanzen der meridionalen skalaren Flüsse VT und VQ ergeben sich in analoger Weise zu den Bilanzen von UT und UQ und werden in Abb. 5.16 zur Vervollständigung gezeigt.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass sich die vertikalen Flüsse WT und WQ unter ei- nem Gleichgewicht von Auftriebsproduktion, Produktion durch mittlere Gradienten sowie Druck-Kovarianz einstellen. Turbulenter Transport ist von untergeordneter Bedeutung. Die Spiegelbildlichkeit von Auftriebsterm und Druck-Kovarianz ist eine wichtige Beobachtung und gibt Hinweise für die Parametrisierung der Druck-Skalar-Kovarianz. Auftrieb, mittlere Gradienten sowie Druck-Kovarianz sind auch für die Aufrechterhaltung der horizontalen Flüsse UT, UQ, VQ, VQ von Bedeutung. Der turbulente Transport ist im Vergleich zu den vertikalen Flüssen bei den Bilanzen der horizontalen Flüsse ebenso wichtig wie die anderen genannten Terme. Insgesamt betrachtet verhalten sich die Bilanzen der Temperaturflüsse analog zu denen der Feuchteflüsse.

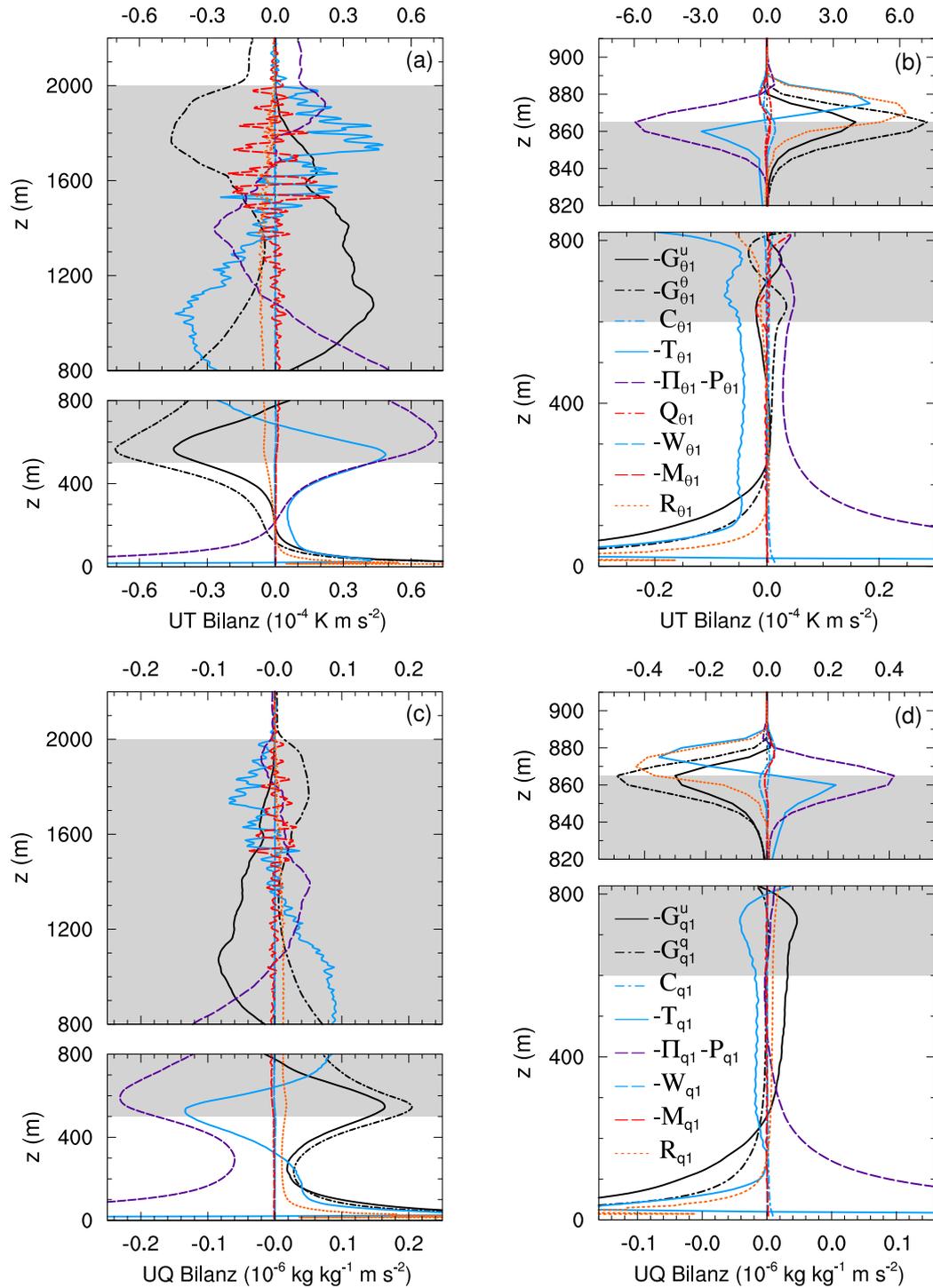


Abbildung 5.15: Vertikalprofile der Bilanzterme des zonalen Flusses UT der potentiellen Flüssigwassertemperatur für BOMEX (a) und DYCOMS (b) und des zonalen Flusses UQ des Gesamtwassergehalts für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Bezeichnung der Bilanzterme von UT ist Gl. 3.17 und die von UQ ist Gl. 3.18 zu entnehmen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In (b) und (d) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

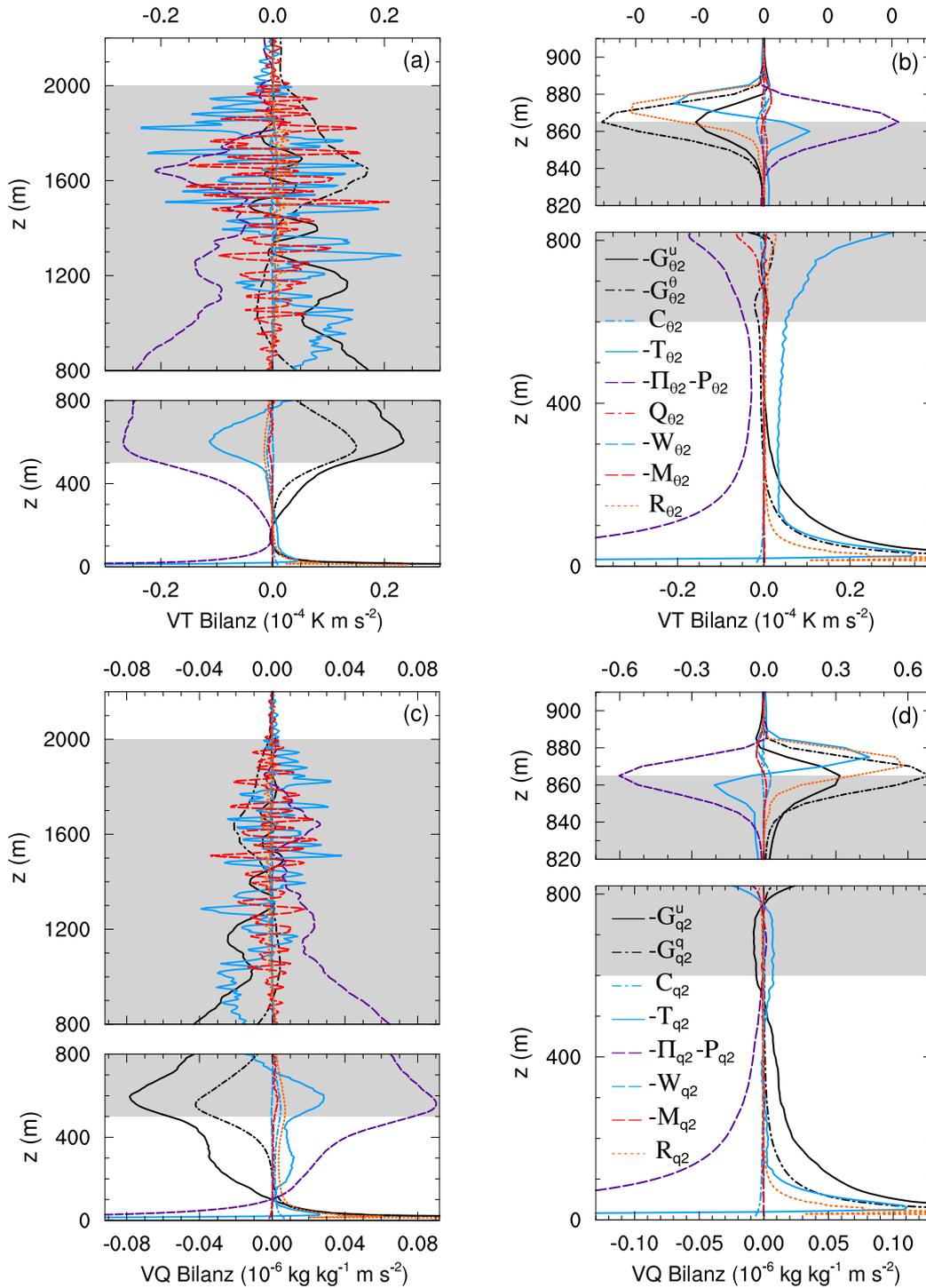


Abbildung 5.16: Vertikalprofile der Bilanzterme des meridionalen Flusses VT der potentiellen Flüssigwassertemperatur für BOMEX (a) und DYCOMS (b) und des meridionalen Flusses VQ des Gesamtwassergehalts für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Bezeichnung der Bilanzterme von UT ist Gl. 3.17 und die von UQ ist Gl. 3.18 zu entnehmen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In (b) und (d) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

5.6 Bilanzen der skalaren Varianzen und Kovarianz

Die in Abb. 5.17 dargestellte Varianz $TT = 0.5 \left(\langle \bar{\theta}_1''^2 \rangle + \langle \vartheta \rangle \right)$ der potentiellen Flüssigwassertemperatur und die Varianz $QQ = 0.5 \left(\langle \bar{q}''^2 \rangle + \langle \kappa \rangle \right)$ des Gesamtwassergehalts zeigen oberflächennah bei BOMEX und DYCOMS ein lokales Maximum. Darüber nehmen sie mit der Höhe ab und sind innerhalb der trockenen Mischungsschicht relativ klein. Dort ist die Schicht gut durchmischt, sodass sich nur kleine Temperatur- und Feuchtefluktuationen ausbilden. Am Oberrand der Mischungsschicht nehmen die Varianzen wieder mit der Höhe zu und sind insbesondere bei DYCOMS um mehrere Größenordnungen größer als in der trockenen Mischungsschicht. Bei BOMEX weisen TT und QQ Maxima am Oberrand der trockenen Mischungsschicht und im Inversionsbereich jeweils ein Maximum auf (Abb. 5.17a). Bei DYCOMS werden die Varianzen am Grenzschichtoberrand maximal (Abb. 5.17b). Dabei sind die Maxima jeweils dort anzutreffen, wo die Gradienten von $\langle \bar{\theta}_1 \rangle$ und $\langle \bar{q} \rangle$ besonders groß sind. In diesen Bereichen wird wärmere und trockenere Luft aus dem Inversionsbereich eingemischt, welches zu großen skalaren Varianzen führt. Die Kovarianz $QT = 0.5 \left(\langle \bar{q}'' \bar{\theta}_1'' \rangle + \langle \tau_{\theta q} \rangle \right)$ aus potentieller Flüssigwassertemperatur und Gesamtwassergehalt ist bei BOMEX und DYCOMS in Oberflächennähe positiv (Abb. 5.17). Die an der Oberfläche durch Konvektion ausgelösten, aufsteigenden Luftpakete sind wärmer ($\bar{\theta}_1'' > 0$) und feuchter ($\bar{q}'' > 0$) als die Umgebung, welches im horizontalen Mittel zu einem positiven QT führt. Die Kovarianz wird bei BOMEX ab einer Höhe von $z = 100$ m und bei DYCOMS ab einer Höhe von $z = 300$ m negativ und weist in denselben Bereichen wie die skalaren Varianzen Extrema auf. In der Kumulusschicht ist die Luft innerhalb der Kumuluswolken kühler ($\bar{\theta}_1'' < 0$) und feuchter ($\bar{q}'' > 0$) und in der Umgebung wärmer ($\bar{\theta}_1'' > 0$) und trockener ($\bar{q}'' < 0$) als im Mittel (CUIJPERS *et al.*, 1996), welches in beiden Fällen zu einer negativen Kovarianz führt. Auch in der Stratokumulusschicht sind die gesättigten Luftpakete kühler und feuchter, und QT ist somit negativ.

Die Bilanzterme von TT und QQ sind im oberen Bereich der Wolkenschichten um mehrere Größenordnungen größer als unterhalb, weshalb unterschiedliche Skalierungen der Abszisse in Abb. 5.18 für die zwei Bereiche verwendet werden. Der mittlere Gradiententerm $\mathcal{G}_{\theta\theta}$ bzw. \mathcal{G}_{qq} , der proportional zum Produkt aus vertikalem skalarem Fluss und Gradienten des mittleren Skalars ist (siehe Gln. 3.24 u. 3.25), weist in den Bereichen mit den größten vertikalen Gradienten von Temperatur und Feuchte Maxima auf und erzeugt Varianz (Abb. 5.18a-d). Der Produktion steht die Dissipation $\mathcal{D}_{\theta\theta}$ bzw. \mathcal{D}_{qq} von Temperatur- bzw. Feuchtevarianz gegenüber. $\mathcal{D}_{\theta\theta}$ bzw. \mathcal{D}_{qq} ist ein reiner Verlustterm und vernichtet die durch den mittleren Gradienten erzeugte Varianz. Der turbulente Transport $\mathcal{T}_{\theta\theta}$ bzw. \mathcal{T}_{qq} , der die Varianz vertikal umverteilt, ist vor allem im mittleren Bereich der Grenzschichten signifikant. Dort gleicht er als Produktionsterm die Dissipation aus. Aber auch am Wolkenoberrand ist der Transport von Bedeutung. Bei BOMEX wird die im unteren Bereich der Kumulusschicht produzierte Varianz in den Inversionsbereich transportiert (Abb. 5.18a,c). Dort gleicht der Transport einen Großteil der Dissipation aus. Bei DYCOMS wird die am Grenzschichtoberrand produzierte Varianz sowohl in den Inversionsbereich als auch in den unteren Bereich der Stratokumulusschicht transportiert, sodass der Transport am Grenzschichtoberrand zum Verlustterm wird (Abb. 5.18b,d). Der Einfluss $\mathcal{Q}_{\theta\theta}$ von Strahlungsabkühlung ist bei DYCOMS von untergeordneter Bedeutung und bei BOMEX aufgrund der Vorgabe der Strahlungsabkühlung als zeitlich invariantes Profil Null. Auch die zeitliche Änderung $\mathcal{M}_{\theta\theta}$ bzw. \mathcal{M}_{qq} und der Einfluss von großräumigem Absinken $\mathcal{W}_{\theta\theta}$ bzw. \mathcal{W}_{qq} sind vernachlässigbar. Die Residuen

$$\mathcal{R}_{\theta\theta} = -\mathcal{G}_{\theta\theta} - \mathcal{T}_{\theta\theta} - \mathcal{D}_{\theta\theta} + \mathcal{Q}_{\theta\theta} - \mathcal{W}_{\theta\theta} - \mathcal{M}_{\theta\theta}, \quad (5.13)$$

$$\mathcal{R}_{qq} = -\mathcal{G}_{qq} - \mathcal{T}_{qq} - \mathcal{D}_{qq} - \mathcal{W}_{qq} - \mathcal{M}_{qq} \quad (5.14)$$

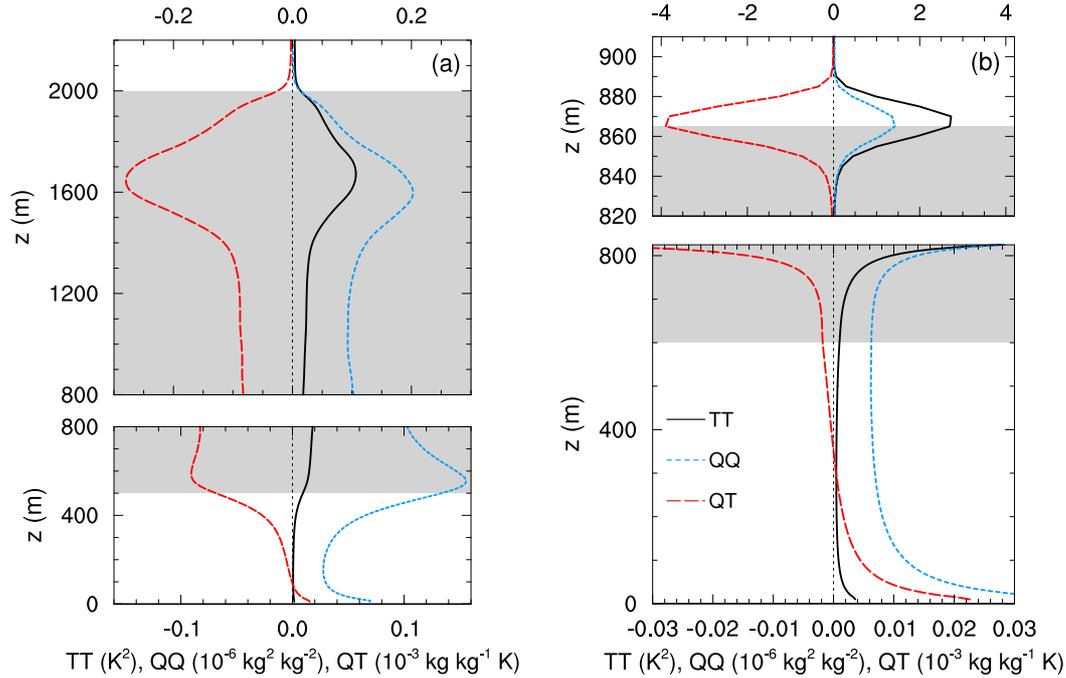


Abbildung 5.17: Vertikalprofile der Varianz $TT = 0.5 \left(\langle \bar{\theta}_1'^2 \rangle + \langle \vartheta \rangle \right)$ der potentiellen Flüssigwassertemperatur, der Varianz $QQ = 0.5 \left(\langle \bar{q}''^2 \rangle + \langle \kappa \rangle \right)$ des Gesamtwassergehalts und der Kovarianz $QT = 0.5 \left(\langle \bar{q}'' \bar{\theta}_1' \rangle + \langle \tau_{\theta q} \rangle \right)$ aus potentieller Flüssigwassertemperatur und Gesamtwassergehalt für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Die Skalierungen der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschichten unterscheiden sich. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

sind bei BOMEX (Abb. 5.18a,c) gering und zeigen eine gute Schließung der Bilanzen an. Auch bei DYCOMS (Abb. 5.18b,d) sind die Residuen, außer am Oberrand der Grenzschicht, kleiner als die Terme führender Ordnung. Am Grenzschichtoberrand ist das Residuum allerdings signifikant. Hier ist, wie im vorherigen Abschnitt 5.5 ausgeführt wurde, die Gitterweite zu grob, um die großen skalaren Gradienten ausreichend aufzulösen. Außerdem wirkt die in Abschnitt 5.1.2 beschriebene numerische Dissipation (MARONGA *et al.*, 2012) auch auf die skalaren Varianzen und glättet die Gradienten noch zusätzlich. Dabei fließen die Gradienten von $\bar{\theta}_1$ und \bar{q} direkt in die Berechnung der Dissipationsraten ϵ_θ und ϵ_q ein (siehe Gl. 3.27), und somit werden ϵ_θ und ϵ_q am Oberrand der Stratokumulusschicht unterschätzt.

Ein Vergleich der bei DEARDORFF (1974b) für eine konvektive Grenzschicht ohne Bewölkung dargestellten Bilanzterme von TT und QQ mit DYCOMS und der trockenen Mischungsschicht von BOMEX (Abb. 5.18) liefert eine gute Übereinstimmung des Verlaufs und der relativen Gewichtung der einzelnen Terme. Auch die in NEGGERS (2009) und DE ROODE und BRETHERTON (2003) dargestellten Bilanzen von QQ bzw. TT für den BOMEX-Fall stimmen hervorragend mit Abb. 5.18a,c überein.

Die Bilanz der Kovarianz QT verhält sich ähnlich zu den Bilanzen von TT und QQ. Allerdings gilt es bei der Interpretation von Abb. 5.19 zu beachten, dass in den Bereichen, wo QT negativ ist, also bei BOMEX für $z > 100$ m und bei DYCOMS für $z > 300$ m (siehe

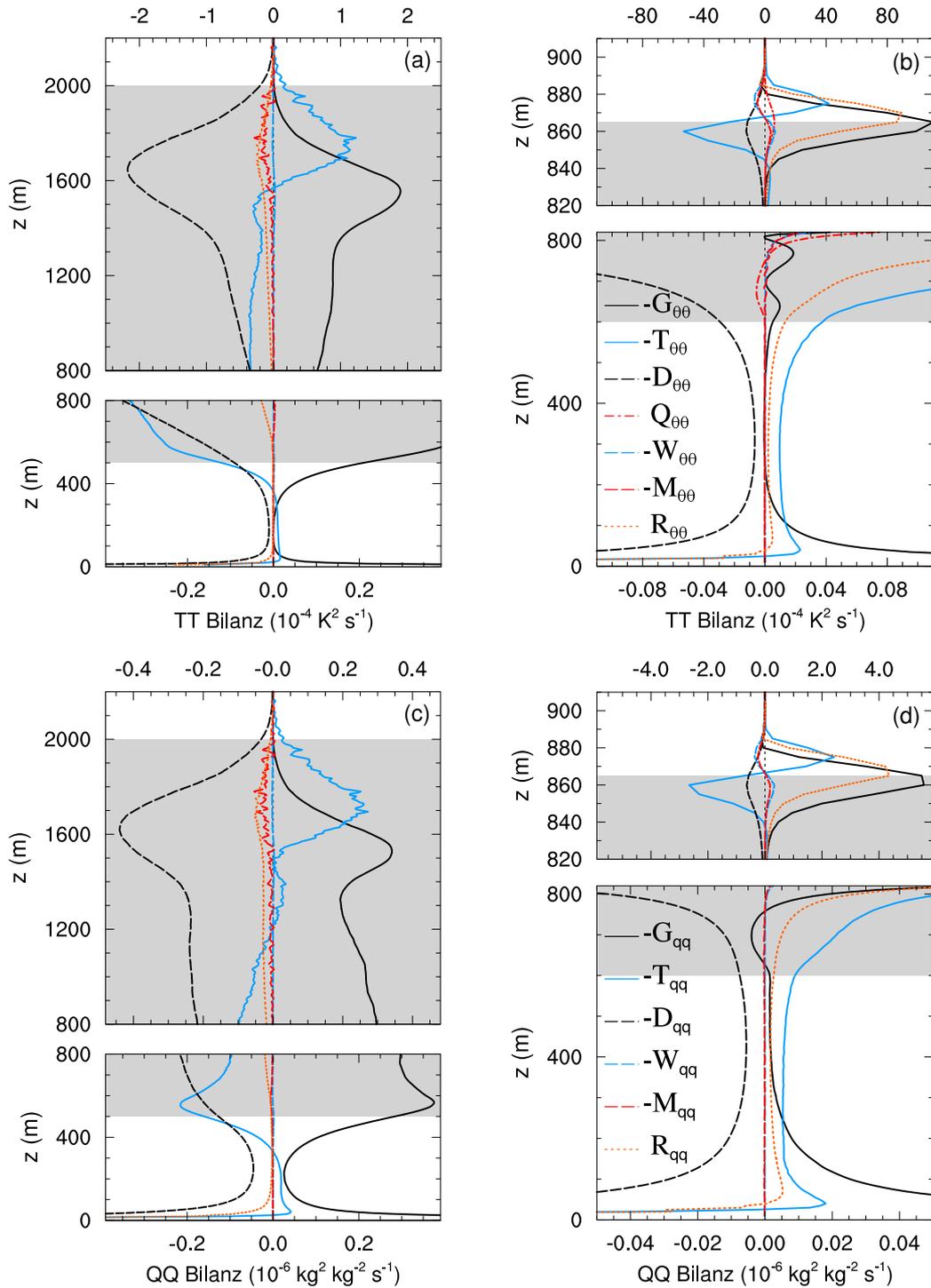


Abbildung 5.18: Vertikalprofile der Bilanzterme für die Varianz TT der potentiellen Flüssigwassertemperatur für BOMEX (a) und DYCOMS (b) und für die Varianz QQ des Gesamtwassergehalts für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Bezeichnung der Bilanzterme von TT ist Gl. 3.24 und die von QQ ist Gl. 3.25 zu entnehmen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In allen Teilabbildungen unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

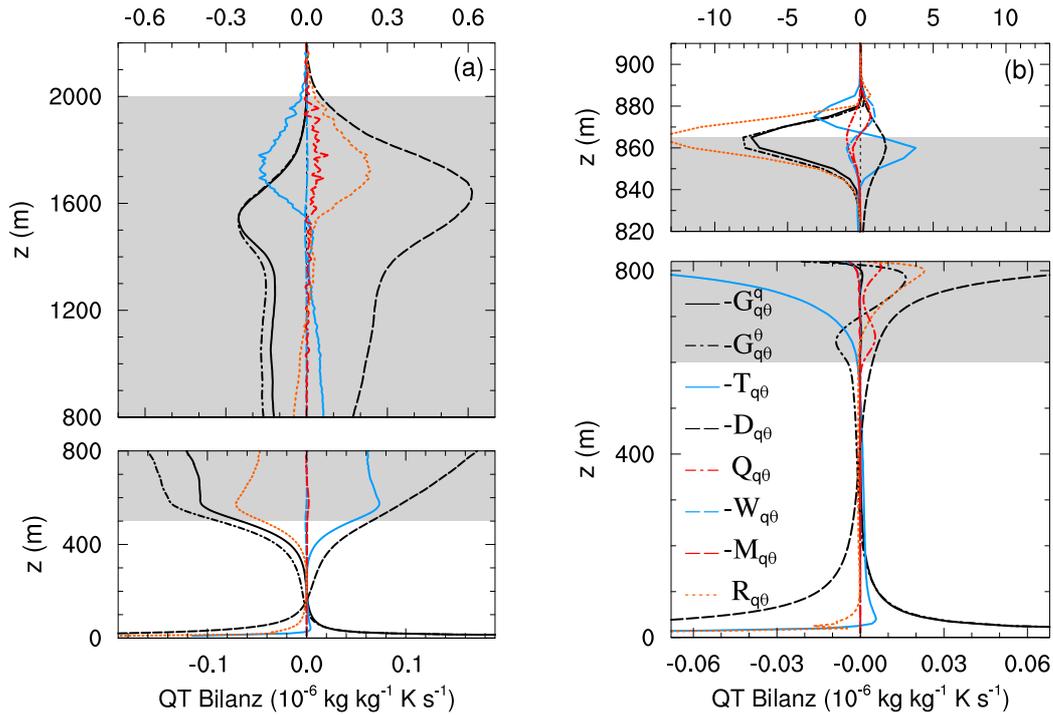


Abbildung 5.19: Vertikalprofile der Bilanzterme der Kovarianz QT aus potentieller Flüssigwassertemperatur und Gesamtwassergehalt für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Die Bezeichnung der Bilanzterme von QT ist Gl. 3.26 zu entnehmen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In allen Teilabbildungen unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolken schichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 5.6 verwendet.

Abb. 5.17), negative Bilanzterme Quellterme und positive Bilanzterme Senkterme darstellen. In der Bilanz von QT tauchen zwei mittlere Gradiententerme auf. $\mathcal{G}_{q\theta}^q$ ist proportional zum Gradienten von $\langle \bar{q} \rangle$ und $\mathcal{G}_{q\theta}^\theta$ zum Gradienten von $\langle \bar{\theta}_1 \rangle$ (siehe Gl. 3.26). Beide Terme sind ungefähr gleich stark ausgeprägt und produzieren in Oberflächennähe positives QT und innerhalb der Wolkenschicht negatives QT (Abb. 5.19). Ausgeglichen wird die Produktion größtenteils über die molekulare Destruktion $\mathcal{D}_{q\theta}$ ² (Abb. 5.19). $\mathcal{D}_{q\theta}$ ist bestrebt den Betrag von QT zu verringern und ist somit positiv, wenn QT negativ ist (siehe auch ANDREAS, 1987). Transport $\mathcal{T}_{q\theta}$ ist vor allem im Inversionsbereich von Bedeutung, in dem er die produzierte Kovarianz umverteilt. Der Einfluss von Strahlungsabkühlung $\mathcal{Q}_{q\theta}$ ist gering. Dies gilt ebenfalls für die zeitliche Änderung $\mathcal{M}_{q\theta}$ und den Einfluss von großräumigem Absinken $\mathcal{W}_{q\theta}$. Das Residuum $\mathcal{R}_{q\theta} = -\mathcal{G}_{q\theta}^q - \mathcal{G}_{q\theta}^\theta - \mathcal{T}_{q\theta} - \mathcal{D}_{q\theta} + \mathcal{Q}_{q\theta} - \mathcal{W}_{q\theta} - \mathcal{M}_{q\theta}$ ist bei BOMEX ein Spiegelbild des Transportterms $\mathcal{T}_{q\theta}$ und relativ groß (Abb. 5.19a). Dies deutet darauf hin, dass der Transportterm zu gering ausfällt, um die Bilanz zu schließen. Für DYCOMS kann dieselbe Beobachtung wie bei den Bilanzen der skalaren Varianzen gemacht werden. Das Residuum ist außer am Oberrand der Grenzschicht klein. Am Grenzschichtoberrand stellt $\mathcal{R}_{q\theta}$ jedoch den betragsmäßig größten Term dar. Hier führen die unzureichende Auflösung und die numerische Dissipation wie bei den Bilanzen von TT

² $\mathcal{D}_{q\theta}$ wird im Gegensatz zu $\mathcal{D}_{\theta\theta}$ oder \mathcal{D}_{qq} nicht als Dissipation sondern molekulare Destruktion bezeichnet, weil sie sowohl positiv als auch negativ sein kann.

und QQ zu einer Unterschätzung der molekularen Destruktionsrate $\mathcal{D}_{q\theta}$.

Die Bilanz von QT wurde bisher selten untersucht. WYNGAARD *et al.* (1978) leiten aus Messungen in der konvektiven Grenzschicht Parametrisierungen für die einzelnen Bilanzterme ab. Sie zeigen, in Übereinstimmung mit den in dieser Arbeit erzielten Ergebnissen, dass in der oberflächennahen Schicht ein Gleichgewicht von Produktion und molekularer Destruktion herrscht und der Transport vernachlässigbar ist. Der bis zum Oberrand der Grenzschicht parametrisierte Verlauf der Bilanzterme stimmt allerdings nur tendenziell mit diesen Ergebnissen überein. Insbesondere liegt die bei WYNGAARD *et al.* (1978) abgeleitete Höhe, in der die Kovarianz und auch die Bilanzterme ihr Vorzeichen wechseln, bei 80 % der Höhe der Grenzschicht und damit weitaus höher als bei BOMEX und DYCOMS.

Die Bilanzen von TT, QQ und QT zeichnen sich bei Kumulus- und Stratokumulusbedeckten Grenzschichten im Großen und Ganzen durch ein Gleichgewicht von Produktion durch den mittleren Gradienten und Vernichtung durch Dissipation bzw. molekulare Destruktion aus. Lokal ist allerdings auch der turbulente Transport von Bedeutung, der vor allem am Unter- und Oberrand der Kumulus- und Stratokumuluschicht signifikant und damit nicht vernachlässigbar ist.

5.7 Schlussfolgerungen für Turbulenzmodelle zweiter Ordnung

Turbulenzmodelle zweiter Ordnung basieren auf den Bilanzgleichungen der statistischen Momente zweiter Ordnung. Die Komplexität dieser Modelle reicht vom Lösen der prognostischen Bilanzgleichungen für jedes Moment zweiter Ordnung bis hin zur Reduktion der Bilanzgleichungen auf algebraische Ausdrücke (MELLOR und YAMADA, 1974). Das Lösen sämtlicher Bilanzgleichungen ist für die Anwendungen in der numerischen Wettervorhersage in der Regel zu komplex und rechenintensiv. Deshalb werden die Bilanzgleichungen vereinfacht, indem Terme mit geringerer Bedeutung vernachlässigt werden (MIRONOV, 2009, S. 177). Im Folgenden soll daher basierend auf den zuvor beschriebenen Ergebnissen gefolgert werden, inwiefern einzelne Bilanzterme vernachlässigt werden können.

Bei der Kumulus- und Stratokumulusbedeckten Grenzschicht sind die Produktionsmechanismen Scherung (mittlere Gradienten) und Auftrieb sowie Dissipation naturgemäß von zentraler Bedeutung, weil sie für direkte Erzeugung bzw. Vernichtung der Momente zweiter Ordnung verantwortlich sind. Sie sind daher Bestandteil eines jeden Turbulenzmodells. Ein Gleichgewicht aus nur diesen Termen bildet z.B. bei den häufig verwendeten Schließungsansätzen von MELLOR und YAMADA (1974) die Grundlage für ein rein algebraisches Modell. Die Produktion durch den Einfluss der Corioliskraft ist bei der in der Atmosphäre auftretenden schwachen Hintergrundrotation sehr klein und kann ohne Weiteres im Turbulenzmodell vernachlässigt werden. Auch das bei BOMEX und DYCOMS benötigte großräumige Absinken hat keinen nennenswerten Einfluss bei der Aufrechterhaltung der Bilanzen. Die langwellige Strahlungsabkühlung, durch welche die Stratokumulusbedeckte Grenzschicht angetrieben wird, wirkt sich in den Bilanzen der Temperaturflüsse und der Temperaturvarianz im Vergleich zu den anderen Mechanismen nur wenig aus und braucht daher nicht zusätzlich in der Turbulenzparametrisierung berücksichtigt werden. Wie verhält es sich nun mit den Umverteilungsmechanismen, welche der turbulente Transport, der Transport durch Druckfluktuationen und die Druck-Kovarianzen sind?

Die relative Gewichtung des turbulenten Transports, der die Momente vertikal umverteilt und Bestandteil jeder Bilanzgleichung der Momente zweiter Ordnung ist, hängt von den Momenten selber ab. Bei den skalaren Varianzen und der TKE ist turbulenter

Transport in weiten Teilen der Grenzschicht von untergeordneter Bedeutung. Allerdings ist er bei diesen Bilanzen, insbesondere im Bereich der Wolkenbasis und am Oberrand der Grenzschicht, lokal signifikant und sollte daher auch bei der Modellierung von Turbulenz im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung berücksichtigt werden. Bei den Bilanzen der vertikalen Impulsflüsse und der vertikalen skalaren Flüsse ist turbulenter Transport im Vergleich zu den übrigen Termen unwichtig, sodass er vernachlässigt werden kann. Dies gilt allerdings nicht für die horizontalen Flüsse. Für sie ist turbulenter Transport ein entscheidender Mechanismus, durch den die Bilanz aufrecht erhalten wird.

Der Transport durch Druckfluktuationen geht in den hier untersuchten, horizontal homogenen Fällen nur in die Bilanzen der TKE, der vertikalen Geschwindigkeitsvarianz und der vertikalen Impulsflüsse ein. Bei der TKE und der vertikalen Geschwindigkeitsvarianz ist dieser Term über weite Teile der Grenzschicht von untergeordneter Bedeutung. Allerdings ist er bei DYCOMS insbesondere am Oberrand der Grenzschicht wichtig und dort ein entscheidender Quellterm. In den Bilanzen der vertikalen Impulsflüsse ist der Transport durch Druckfluktuationen über die gesamte Grenzschicht signifikant. Allerdings wird dieser Term häufig bei vereinfachten Schließungen zweiter Ordnung vernachlässigt oder in einer Parametrisierung für den turbulenten Transport berücksichtigt (z.B. MANSOUR *et al.*, 1988; MIRONOV, 2009, S. 171). Mit Blick auf die Ergebnisse für die bewölkten Grenzschichten sollte der Transport durch Druckfluktuationen bei der Modellierung der vertikalen Impulsflüsse jedoch auf jeden Fall einbezogen werden.

Die Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen sind in den Bilanzgleichungen der Impulsflüsse, der Geschwindigkeitsvarianzen und der skalaren Flüsse für den Transfer der Momente innerhalb der Komponenten verantwortlich und werden auch als *return-to-isotropy*-Terme bezeichnet. Sie haben einen ausgleichenden Charakter, weil sie bestrebt sind, die Strömung in einen isotropen Zustand zurückzuführen. Diese Terme sind bei den untersuchten Grenzschichten für die Erzeugung der Momente zweiter Ordnung von besonderer Wichtigkeit und sollten auf jeden Fall auch in vereinfachten Turbulenzmodellen, in denen nicht für alle Momente zweiter Ordnung prognostische Gleichungen gelöst werden, berücksichtigt werden.

6 Modellierung von Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen

Eine zentrale Aufgabenstellung im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung stellt die Modellierung der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen dar. Diese Terme sind in den Bilanzen der Impulsflüsse und der skalaren Flüsse von zentraler Bedeutung, da sie für eine Umverteilung der hauptsächlich durch Auftrieb und Scherung erzeugten Flüsse sorgen. Ihre Modellierung beruht darauf, die Druck-Kovarianzen in Anteile aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb und Corioliskraft zu zerlegen und jeden Anteil separat zu parametrisieren. Um diese Zerlegung durchführen zu können, müssen zunächst die Anteile der turbulenten Druckfluktuation aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb und Corioliskraft ermittelt werden. Dies ist nur mit turbulenzauflösenden Modellen wie der LES möglich und geschieht über das Lösen von Poisson-Gleichungen für jeden Anteil (wie in Abschnitt 3.2 bereits erläutert wurde). Somit kann mit der LES eine umfassende Datengrundlage bereit gestellt werden, mit Hilfe derer Parametrisierungen für die Druck-Kovarianzen überprüft werden können. Bisher wurden allerdings für geophysikalische Modelle Parametrisierungen der Druck-Skalar-Kovarianzen nur für trockene Grenzschichten mit LES untersucht und daraus Modellierungskonstanten abgeleitet (MOENG und WYNGAARD, 1986; ANDRÉN und MOENG, 1993; MIRONOV, 2001). Ob die in Turbulenzmodellen verwendeten Parametrisierungen der Druck-Kovarianzen auch für bewölkte Grenzschichten geeignet sind, ist bisher nicht untersucht worden. Daraus ergibt sich die zweite zentrale Fragestellung der vorliegenden Arbeit, die sich damit befasst, für die numerische Wettervorhersage gängige Parametrisierungen der Druck-Kovarianzen bei bewölkten Grenzschichten zu überprüfen und daraus Modellierungskonstanten sowie Schlussfolgerungen für die Modellierung abzuleiten.

Zunächst wird in Kapitel 6.1 die in Abschnitt 3.2 vorgestellte Methode zur Bestimmung der einzelnen Anteile am turbulenten Druckfeld anhand eines Vergleichs mit der Literatur überprüft. Anschließend folgt eine Analyse der sich aus der Zerlegung der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz ergebenden Anteile (Kap. 6.2) bei den bewölkten Grenzschichten und ein Vergleich von zwei Aufspaltungen für die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz (Kap. 6.3). Die Frage danach, wie die einzelnen Anteile der Druck-Skalar-Kovarianzen aussehen, wird in Kapitel 6.4 beantwortet. In Kapitel 6.5 werden für die wesentlichen Anteile aufgrund von Turbulenz, Scherung und Auftrieb gängige Parametrisierungen der Druck-Kovarianzen mit den LES-Daten verglichen und Modellierungskonstanten ermittelt, die sich bei den bewölkten Grenzschichten ergeben. Außerdem erfolgt eine Untersuchung, wie sich die Modellierungskonstanten in Abhängigkeit von der verwendeten Aufspaltung einstellen. Abschließend werden aus den Ergebnissen Schlussfolgerungen für die Modellierung der Druck-Kovarianzen gezogen (Kap. 6.6).

6.1 Validierung der Zerlegung anhand der trockenen konvektiven Grenzschicht

Die in Abschnitt 3.2.2 beschriebene Methode zur Zerlegung der turbulenten Druckfluktuation $\overline{p''}$ in Anteile aufgrund von turbulenten Interaktionen (T), Scherung (S), Auftrieb (B), Corioliskraft (C), Subskalmodell (SG) und großräumigem Absinken (SU) zu $\overline{p''} = \overline{p''}_T + \overline{p''}_S + \overline{p''}_B + \overline{p''}_C + \overline{p''}_{SG} + \overline{p''}_{SU}$ soll nachfolgend überprüft werden. Dazu wird die in Abschnitt 4.1 beschriebene Simulation FC der trockenen konvektiven Grenzschicht ohne mittleren Wind herangezogen und mit Resultaten von MIRONOV (2001, Fall R0) verglichen. Der Fall R0 unterscheidet sich nur in der Stärke des oberflächennahen Wärmestroms von $H_{\theta 0} = 0.1 \text{ K m s}^{-1}$ und der Stärke der abschließenden Inversion von 0.03 K m^{-1} maßgeblich von FC. Damit wird bei R0 weniger stark geheizt und ein geringerer Temperaturgradient in der Inversion verwendet. Da die Ergebnisse in MIRONOV (2001) mit der Höhe der Grenzschicht und den konvektiven Skalen normiert werden, ist ein direkter Vergleich bis in eine Höhe von ca. $0.8 z_i$ möglich und nicht darüber hinaus, weil die Größen in diesem Bereich nicht mehr nur mit den oberflächennahen Flüssen skalieren (MOENE *et al.*, 2006).

Abb. 6.1 zeigt anhand der Standardabweichung $\langle \overline{p''} \rangle^{1/2}$ der Druckfluktuation und ihrer Anteile, dass der turbulente Anteil über weite Teile der Grenzschicht der dominierende ist. In der Nähe der Oberfläche und im Inversionsbereich ist der Auftriebsanteil maximal und in derselben Größenordnung wie der turbulente Anteil. Der Anteil aufgrund des subskaligen Impulsflusses nimmt mit der Höhe ab und stellt nur einen kleinen Anteil der gesamten Druckfluktuation dar. Der Scherungsanteil verschwindet, weil kein mittlerer Wind vorhanden ist. R0 und FC wurden ohne Hintergrundrotation und großräumiges Absinken simuliert, sodass auch die Anteile aufgrund von Corioliskraft und Absinken verschwinden.

Ein Vergleich von R0 (Abb. 6.1a) mit FC (Abb. 6.1b) zeigt für den Kern der Grenzschicht ($0.1 h < z < 0.8 h$), dass Verlauf und Betrag der Anteile sowie der gesamten Standardabweichung sehr gut übereinstimmen. Auch außerhalb dieses Bereichs sind die relativen Verhältnisse der Terme zueinander vergleichbar. Im Inversionsbereich weisen der Auftriebsanteil und die gesamte Standardabweichung bei FC (Abb. 6.1b) ein ausgeprägteres, lokales Maximum auf. Die Verläufe und relativen Verhältnisse der Anteile zueinander stimmen auch mit den bei MOENG und WYNGAARD (1986) und MILES *et al.* (2004) dargestellten überein. Die in Abb. 6.2a dargestellte Standardabweichung $\langle \overline{p''} \rangle^{1/2}$ der im LES-Modell ermittelten Druckfluktuation unterscheidet sich leicht von der Quadratwurzel $\langle \overline{p''}_S^2 + \overline{p''}_T^2 + \overline{p''}_B^2 + \overline{p''}_C^2 + \overline{p''}_{SG}^2 \rangle^{1/2}$ der Summe der Varianzanteile. Dies bedeutet, dass die Kovarianzen der einzelnen Druckanteile wie $\langle \overline{p''}_B \overline{p''}_S \rangle$ usw. nicht verschwinden und demnach die einzelnen Druckanteile miteinander korreliert sind (vgl. MOENG und WYNGAARD, 1986; MIRONOV, 2001).

Abb. 6.3 enthält die Anteile der vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$. Daraus ist abzulesen, dass der Auftriebsanteil $\Pi_{\theta 3}^B$ und der Anteil $\Pi_{\theta 3}^T$ aufgrund von turbulenten Interaktionen über weite Teile der Grenzschicht ($0.1 h < z < 0.8 h$) in derselben Größenordnung sind. Dabei ist der turbulente Anteil $\Pi_{\theta 3}^T$ betragsmäßig ein wenig größer. Am Oberrand der Grenzschicht wird die gesamte Druck-Kovarianz durch den Auftriebsanteil dominiert. $\Pi_{\theta 3}^T$ wechselt in diesem Bereich das Vorzeichen und der subskalige Anteil $\Pi_{\theta 3}^{SG}$ ist außer bei $z = h$ und in der Nähe des Bodens verschwindend gering.

Im Vergleich mit R0 (Abb. 6.3a) ergibt sich für ca. $0.1 h < z < 0.8 h$ eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von FC (Abb. 6.3b), wobei die gesamte Kovarianz und ihre Anteile bei FC betragsmäßig größer ausfallen. Im Inversionsbereich sind die Extrema von $\Pi_{\theta 3}^B$ und $\Pi_{\theta 3}^T$ bei FC deutlich stärker ausgeprägt. Dies hängt damit zusammen, dass

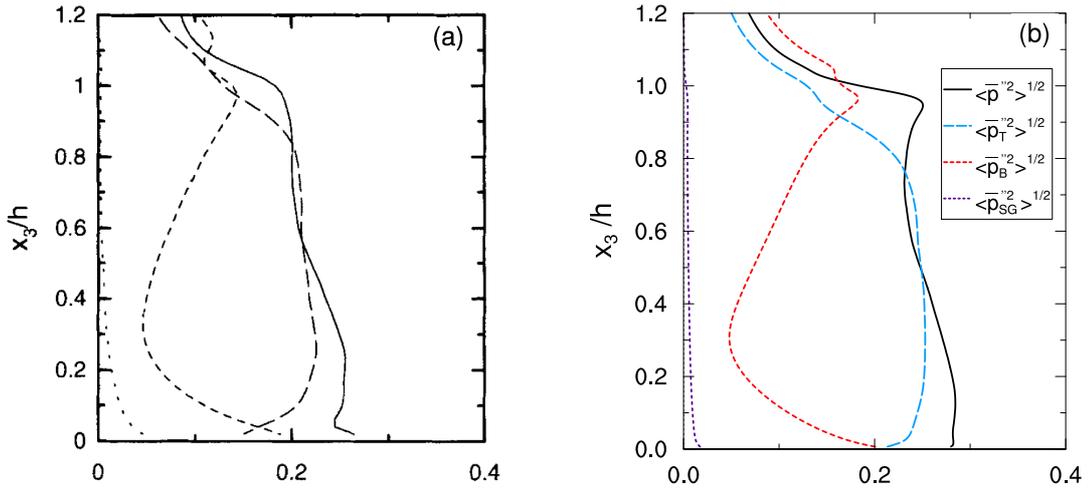


Abbildung 6.1: Vertikalprofile der Standardabweichung $\langle \bar{p}'' \rangle^{1/2}$ der turbulenten Druckfluktuation und ihre Anteile für die trockene konvektive Grenzschicht. (a) ist ein Nachdruck von MIRONOV (2001, Abb. 1, Fall R0) mit Genehmigung von John Wiley & Sons und (b) enthält die Standardabweichungen der Simulation FC. Durchgezogene Linien kennzeichnen die Standardabweichung $\langle \bar{p}'' \rangle^{1/2}$ der totalen Druckfluktuation, lang gestrichelte Linien den Anteil $\langle \bar{p}''_T \rangle^{1/2}$ aufgrund von turbulenten Interaktionen, kurz gestrichelte Linien den Anteil $\langle \bar{p}''_B \rangle^{1/2}$ aufgrund von Auftrieb und gepunktete Linien den Anteil $\langle \bar{p}''_{SG} \rangle^{1/2}$ aufgrund von SGS-Impulsflüssen. Die Terme sind mit $\rho_0 w_*^2$ normiert und in (b) über zwei Stunden gemittelt. Die vertikale Achse wird mit x_3 bezeichnet.

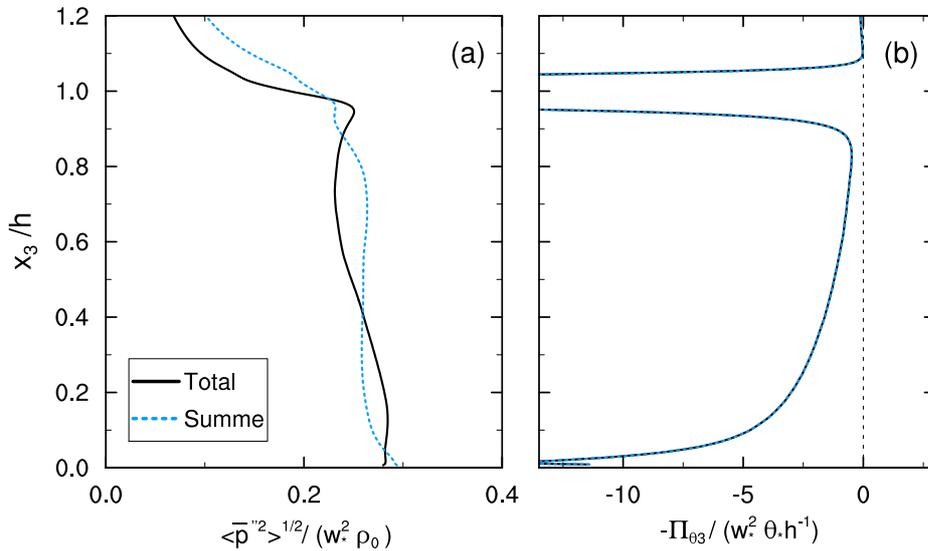


Abbildung 6.2: Vergleich der normierten totalen Standardabweichung $\langle \bar{p}'' \rangle^{1/2}$ der Druckfluktuation (a) und der normierten vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$ (b) mit der jeweiligen Summe aller Anteile für die trockene konvektive Grenzschicht. Durchgezogene Linien zeigen jeweils die totalen Terme und gepunktete Linien die jeweilige Summe aller Anteile der Terme an. Die Mittelung der Profile erfolgt über zwei Stunden. Die vertikale Achse wird mit x_3 bezeichnet.

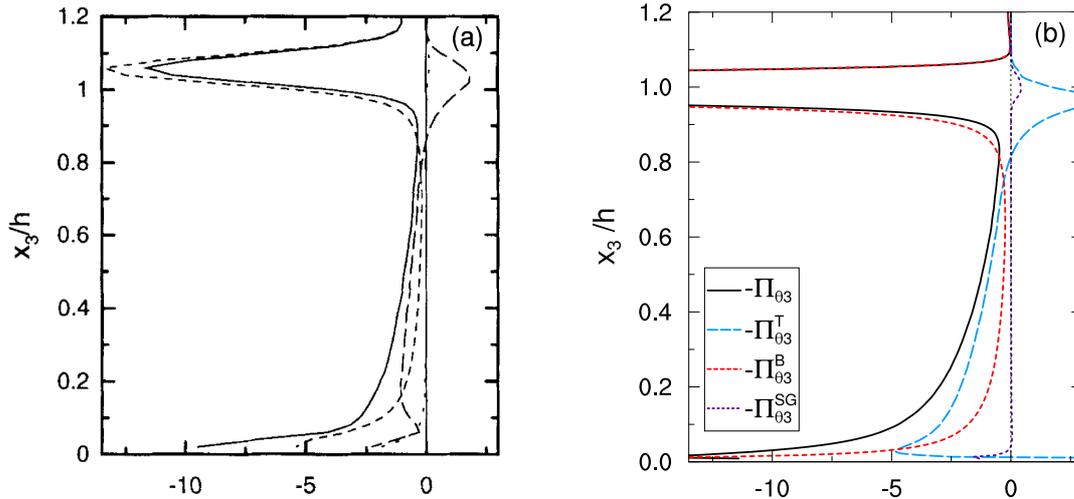


Abbildung 6.3: Vertikalprofile der vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz $-\Pi_{\theta_3}$ und ihre Anteile für die trockene konvektive Grenzschicht. (a) ist ein Nachdruck von MIRONOV (2001, Abb. 2, Fall R0) mit Genehmigung von John Wiley & Sons und (b) enthält die Druck-Kovarianzen der Simulation FC. Durchgezogene Linien kennzeichnen die gesamte Kovarianz Π_{θ_3} , lang gestrichelte Linien den Anteil $\Pi_{\theta_3}^T$ aufgrund von turbulenten Interaktionen, kurz gestrichelte Linien den Anteil $\Pi_{\theta_3}^B$ aufgrund von Auftrieb und gepunktete Linien den Anteil $\Pi_{\theta_3}^{SG}$ aufgrund von SGS-Impulsflüssen. Die Terme werden mit demselben Vorzeichen wie in der Bilanzgleichung 3.17 dargestellt. Die Terme sind mit $w_*^2 \theta_* h^{-1}$ normiert und in (b) über zwei Stunden gemittelt. Die vertikale Achse wird mit x_3 bezeichnet.

der Temperaturgradient im Inversionsbereich bei FC nahezu doppelt so groß im Vergleich zu R0 ist. Folglich sind auch die dort auftretenden Fluktuationen des Druckes (siehe auch Abb. 6.1a) und der Temperatur deutlich größer, welches zu den stark ausgeprägten Anteilen $\Pi_{\theta_3}^B$ und $\Pi_{\theta_3}^T$ am Oberrand der Grenzschicht führt.

Abb. 6.2b verdeutlicht, dass die totale Kovarianz Π_{θ_3} , in welche die totale Druckfluktuation aus dem LES-Modell eingeht, exakt mit der Summe $\Pi_{\theta_3}^T + \Pi_{\theta_3}^B + \Pi_{\theta_3}^{SG}$ der Anteile übereinstimmt. Dies zeigt, dass unter Verwendung der in Abschnitt 3.2.2 vorgestellten Methode, die Zerlegung $\bar{p}'' = \bar{p}''_T + \bar{p}''_B + \bar{p}''_{SG}$ zu Maschinengenauigkeit gilt und die verwendete Methode zur Zerlegung der Druck-Kovarianzen funktioniert.

Der soeben durchgeführte Vergleich verdeutlicht, dass die für trockene konvektive Grenzschichten publizierten Ergebnisse bezüglich der Anteile der turbulenten Druckfluktuation und der vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz reproduziert werden können. Damit ist die Umsetzung der Methode zur Zerlegung der Druckfluktuationen hinreichend validiert, um für die bewölkten Grenzschichten belastbare Ergebnisse zu liefern.

6.2 Komponenten der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen

Die sich aus der Zerlegung der turbulenten Druckfluktuation ergebenden Anteile der Standardabweichung $\langle \bar{p}'' \rangle^{1/2}$ für BOMEX und DYCOMS sind in Abb. 6.4 dargestellt. Bei BOMEX stellt der Anteil aufgrund von Auftrieb, der ein Maximum in der Inversionsschicht ($z < 1500$ m) aufweist, über die gesamte Grenzschicht den größten Anteil dar (Abb. 6.4a). Der Beitrag aufgrund von turbulenten Interaktionen ist der zweitgrößte Anteil an der to-

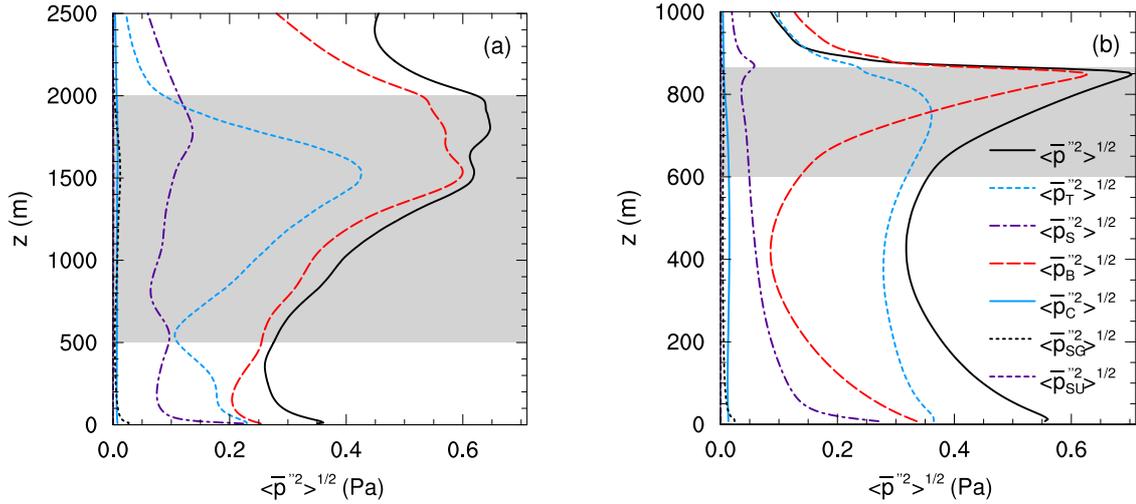


Abbildung 6.4: Vertikalprofile der Standardabweichung $\langle \bar{p}'' \rangle^{1/2}$ der turbulenten Druckfluktuation für BOMEX (a) und DYCOMS (b) mit ihren Anteilen aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb, Corioliskraft, Subskalenmodell und großräumigem Absinken. Bereiche der Kumulus- und Stratokumulusbewölkung sind jeweils grau unterlegt. Der Mittelungszeitraum beträgt 3 h bei BOMEX und 2 h bei DYCOMS.

talen Standardabweichung und weist ein Maximum im Inversionsbereich auf. Da ein mittlerer Grenzschichtwind vorhanden ist, ergibt sich auch ein Anteil durch Scherung. Dieser ist in der Nähe der Oberfläche maximal, weil dort die größten Gradienten der Geschwindigkeit auftreten. Wie bei der trockenen Grenzschicht (Simulation FC, Abb. 6.1b) stellt auch bei DYCOMS der Anteil aufgrund von turbulenten Interaktionen über weite Teile der Grenzschicht den größten Anteil dar (Abb. 6.4b). Am Oberrand der Stratokumuluschicht wird jedoch der Auftriebsanteil bedeutsamer, sodass der Verlauf von $\langle \bar{p}'' \rangle^{1/2}$ durch diesen bestimmt wird. Die langwellige Strahlungsabkühlung, durch die eine Labilisierung und damit Auftrieb hervorgerufen wird, ist dort am größten. Wie bei BOMEX ist auch bei DYCOMS der Scherungsanteil von geringerer Bedeutung als die Anteile durch Auftrieb und Turbulenz. Bei beiden bewölkten Grenzschichten ist der Anteil, der vom Subskalenmodell herrührt, klein. Dies gilt ebenfalls für die Anteile aufgrund von Corioliskraft und großräumigem Absinken. Wie auch bereits die Analyse der Bilanzen der Momente zweiter Ordnung in Kapitel 5 zeigt, sind diese zwei Prozesse für die Aufrechterhaltung der Bilanzen bei bewölkten Grenzschichten von untergeordneter Bedeutung. Da ihre Anteile an der turbulenten Druckfluktuation ebenfalls sehr gering sind, werden sie in den in diesem Kapitel noch folgenden Abbildungen nicht mit aufgeführt.

Der wesentliche Unterschied zwischen BOMEX und DYCOMS bezüglich der Anteile der Druckfluktuation liegt darin, dass bei BOMEX über die gesamte Grenzschicht der Auftriebsanteil den größten Anteil darstellt. Dagegen stellt Auftrieb bei DYCOMS nur am Wolkenoberrand den größten Anteil. Hieran werden die beiden unterschiedlichen Antriebsmechanismen der zwei bewölkten Grenzschichten deutlich. Während BOMEX durch Erwärmung der Oberfläche angetrieben wird, erfolgt bei DYCOMS die Turbulenzgenerierung durch Auftrieb vornehmlich am Oberrand der Grenzschicht.

Die Diagonalkomponenten Π_{11} und Π_{33} der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz und ihre jeweiligen Anteile sind Abb. 6.5 zu entnehmen. Wie in Abschnitt 5.3 anhand der Bilanzen

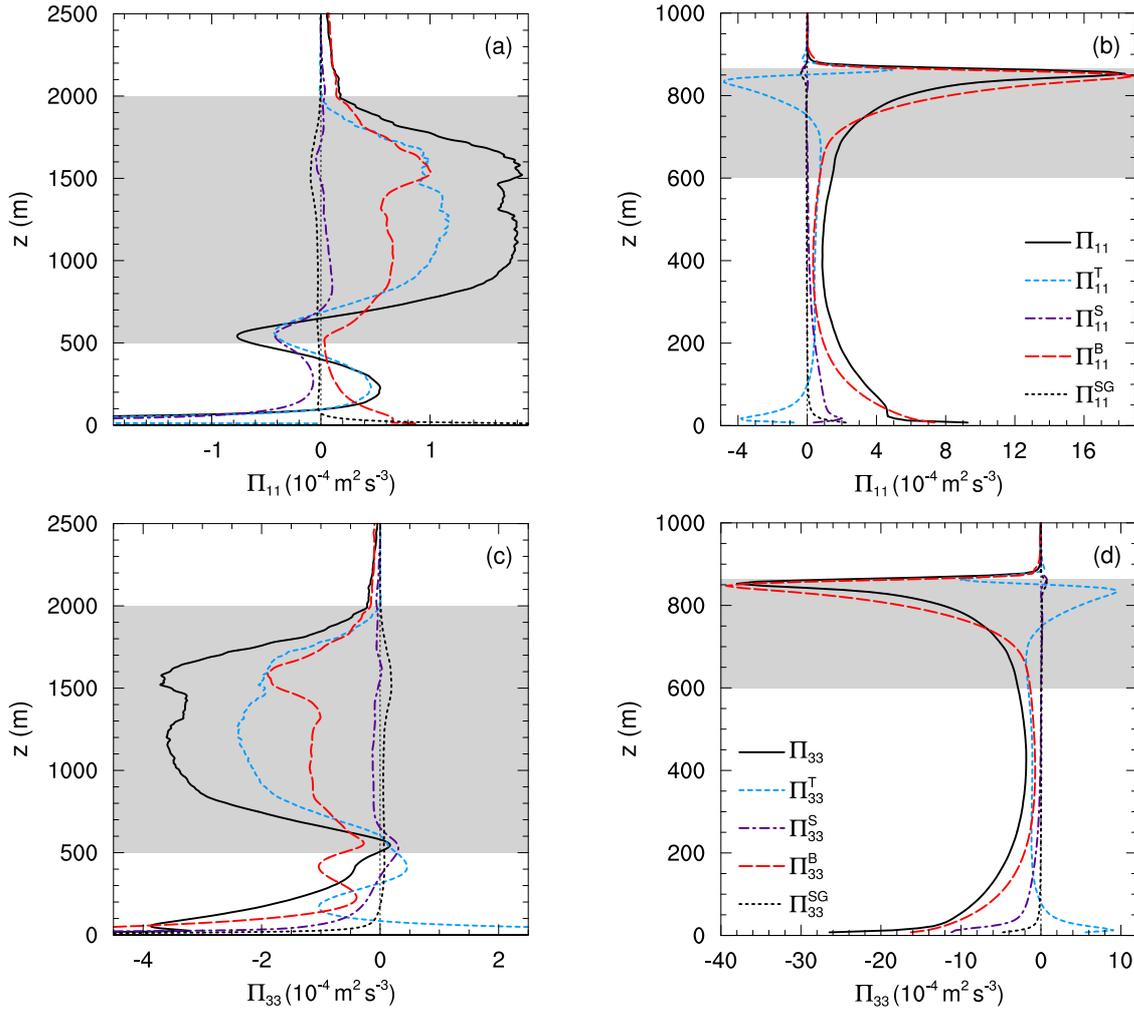


Abbildung 6.5: Vertikalprofile der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{11} für BOMEX (a) und DYCOMS (b) sowie Π_{33} für BOMEX (c) und DYCOMS (d) mit ihren jeweiligen Anteilen aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb und Subskalenmodell. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

der Geschwindigkeitsvarianzen gezeigt wird, verteilen Π_{11} , Π_{22} und Π_{33} TKE zwischen den Komponenten der TKE um. Dabei wird z.B. die durch Auftrieb erzeugte TKE durch die Druck-Kovarianzen zu den horizontalen Komponenten transferiert. Daher ist auch Π_{33} (Abb. 6.5c,d) vornehmlich ein Verlustterm (negativ) und Π_{11} (Abb. 6.5a,b) ein Quellterm (positiv) in den jeweiligen Bilanzen. Die Zerlegung zeigt nun, dass bei BOMEX im Bereich der Kumuluswolken Π_{11}^B , Π_{33}^B und Π_{11}^T , Π_{33}^T in derselben Größenordnung sind und die maßgeblichen Beiträge zur totalen Druck-Kovarianz darstellen (Abb. 6.5a,c). Der Scherungsanteil Π_{11}^S , Π_{33}^S ist vor allem in der Nähe der Oberfläche und am Oberrand der trockenen Mischungsschicht, wo durch die Drehung des mittleren Grenzschichtwindes in Richtung des geostrophischen Wind Scherung auftritt, signifikant. Bei DYCOMS sind abgesehen vom oberen Bereich der Stratokumulus-Schicht der turbulente Anteil und der Auftriebsanteil von Π_{11} und Π_{33} von ähnlicher Bedeutung (Abb. 6.5b,d). Innerhalb der Wolkenschicht dominiert jedoch Π_{11}^B bzw. Π_{33}^B und stellt den maßgeblichen Beitrag zur

totalen Kovarianz. Hier ist die Auftriebsproduktion von vertikaler Varianz besonders stark ausgeprägt (siehe Abb. 5.9f) und gelangt über die Druck-Kovarianz in die horizontalen Komponenten, sodass auch Π_{11} einen signifikanten Auftriebsanteil aufweist, obwohl $\overline{u''^2}$ nicht direkt durch Auftrieb erzeugt werden kann. Der Scherungsanteil ist bei DYCOMS über weite Teile der Grenzschicht von geringer Bedeutung und in der oberflächennahen Schicht ähnlich bedeutend wie Π_{11}^B , Π_{33}^B und Π_{11}^T , Π_{33}^T . Der turbulente Anteil weist bei DYCOMS am Oberrand der Stratokumulusschicht und in der oberflächennahen Schicht das entgegengesetzte Vorzeichen von der totalen Kovarianz und den übrigen Anteilen auf. Damit wirken Π_{11}^T und Π_{33}^T in den Bilanzen genau entgegengesetzt zu den jeweiligen totalen Kovarianzen und führen am Grenzschichtoberrand und in Oberflächennähe zu Vernichtung von UU bzw. Produktion von WW. Dies zeigt, dass nicht alle Anteile der Druck-Kovarianz für eine Umverteilung sorgen und konnte auch von MANSOUR *et al.* (1988) für eine turbulente Strömung zwischen zwei Platten beobachtet werden. Eine Erklärung für dieses Verhalten konnte bisher nicht ermittelt werden. Der subskalige Anteil Π_{11}^{SG} , Π_{33}^{SG} ist nur in der Nähe der Oberfläche signifikant, aber auch dort kleiner als die übrigen Anteile. Die Zerlegung von Π_{22} ergibt sich analog zu der von Π_{11} und wird daher nicht separat dargestellt.

Als Beispiel für die Nebendiagonalkomponenten von Π_{ij} ist in Abb. 6.6 Π_{13} mit ihren Anteilen dargestellt. Bei BOMEX sind Π_{13}^T , Π_{13}^B und Π_{13}^S in der trockenen Mischungsschicht ($z < 500$ m) in derselben Größenordnung und damit ähnlich bedeutend für die gesamte Kovarianz (Abb. 6.6a). Innerhalb der Kumulusschicht nimmt die Bedeutung des turbulenten Anteils ab und die gesamte Kovarianz wird vom Auftriebs- und Scherungsanteil bestimmt. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass innerhalb der Kumulusschicht Scherungsterm \mathcal{G}_{13} und Auftriebsterm \mathcal{B}_{13} die Bilanz bestimmen (siehe auch Abb. 5.11a) und damit die wichtigsten Produktionsprozesse sind, welche durch die Druck-Kovarianz ausgeglichen werden. Ähnliche Beobachtungen lassen sich auch für DYCOMS machen (Abb. 6.6b). Allerdings ist der turbulente Anteil bei DYCOMS auch innerhalb der Wolkenschicht in derselben Größenordnung wie Auftriebs- und Scherungsanteil. Die Zerlegung von Π_{23} weist dieselben Charakteristika wie die von Π_{13} auf und wird daher nicht separat dargestellt. Für die horizontale Druck-Kovarianz Π_{12} sind die Anteile aufgrund von Scherung, Auftrieb und Turbulenz bei BOMEX in etwa gleich bedeutend. Darüber wird Π_{12} maßgeblich vom Scherungsanteil bestimmt (nicht gezeigt), welches sich auf die Spiegelbildlichkeit von Scherungsproduktion \mathcal{G}_{12} und Druck-Kovarianz Π_{12} zurückführen lässt (siehe auch Abb. 5.12a). Bei DYCOMS stellt sich im Gegensatz zu BOMEX keine Dominanz des Scherungsanteils ein. In der oberflächennahen Schicht sind Π_{12}^T , Π_{12}^B und Π_{12}^S in derselben Größenordnung und innerhalb der Wolkenschicht bestimmen der turbulente Anteil und der Auftriebsanteil die Druck-Kovarianz (nicht gezeigt). Wie bei den Diagonalkomponenten sind auch bei allen Nebendiagonalkomponenten von Π_{ij} die subskaligen Anteile kleiner als die übrigen Anteile.

An dieser Stelle lässt sich festhalten, dass die Anteile der Druckfluktuation aufgrund von Turbulenz, Auftrieb und Scherung die maßgeblichen Beiträge liefern. Dies gilt ebenso für die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen, wobei der Scherungsanteil bei den Diagonalkomponenten innerhalb der Wolkenschichten vernachlässigbar ist. In den meisten Fällen stellt der Auftriebsanteil innerhalb der Wolkenschichten den größten Anteil dar, ohne dass der Anteil aufgrund von turbulenten Interaktionen vernachlässigbar ist. Der Scherungsanteil ist überwiegend in der Nähe der Oberfläche entscheidend. Innerhalb der trockenen Mischungsschichten sind der turbulente Anteil sowie Scherungs- und Auftriebsanteil von gleicher Bedeutung für die totale Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz.

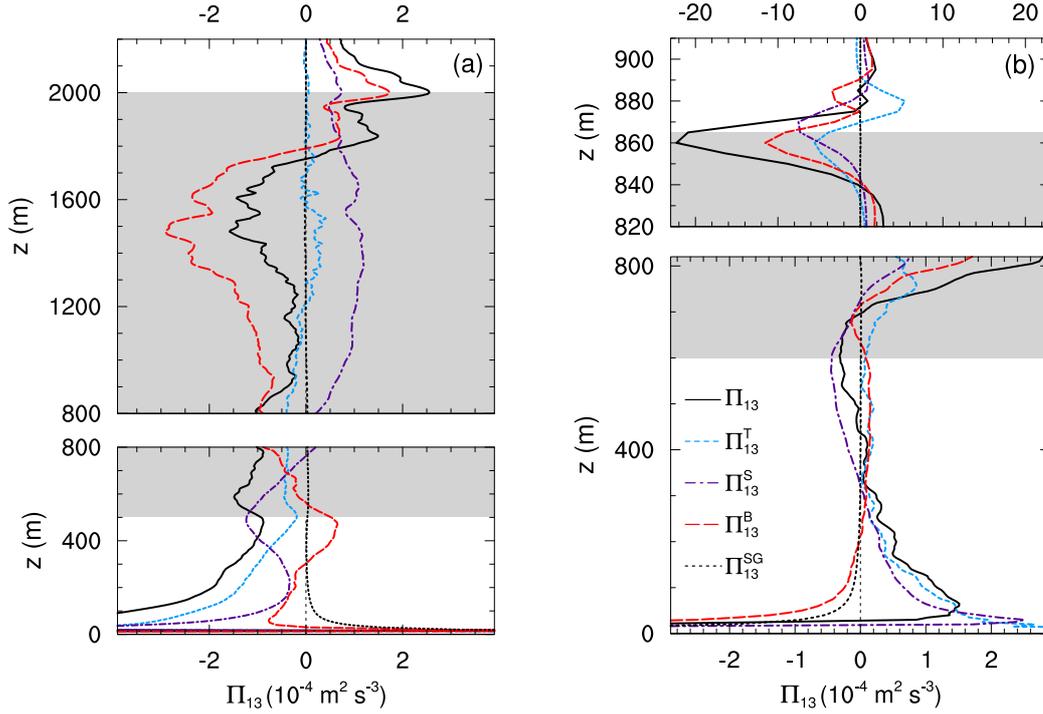


Abbildung 6.6: Vertikalprofile der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{13} für BOMEX (a) und DYCOMS (b) mit ihren jeweiligen Anteilen aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb und Subskalenmodell. In (b) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenschichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

6.3 Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen

Die Aufspaltung der ursprünglich in die Impulsflussbilanzen (Gl. 3.12) einfließenden Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen

$$\tilde{\phi}_{ij} = \frac{1}{\rho_0} \left(\left\langle \bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{p}''}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{p}''}{\partial x_i} \right\rangle \right) \quad (6.1)$$

ist nicht eindeutig (LUMLEY, 1975) (siehe auch Abschnitt 3.1.1). Der Grund dafür, dass bei der Turbulenzparametrisierung häufig eine Aufspaltung von $\tilde{\phi}_{ij}$ vorgenommen wird, besteht darin, dass die physikalische Bedeutung von $\tilde{\phi}_{ij}$ weniger offensichtlich ist (z.B. HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 25) und daher durch eine Aufspaltung die Modellierung handhabbarer wird. Alternativ zur traditionellen Aufspaltung von $\tilde{\phi}_{ij}$ in Druck-Transport \mathcal{T}_{ij}^P und Druck-Deformation Π_{ij} (Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianz),

$$\tilde{\phi}_{ij} = \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_k} (\delta_{jk} \langle \bar{u}_i'' \bar{p}'' \rangle + \delta_{ik} \langle \bar{u}_j'' \bar{p}'' \rangle)}_{\mathcal{T}_{ij}^P} - \underbrace{\frac{1}{\rho_0} \langle \bar{p}'' \left(\frac{\partial \bar{u}_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j''}{\partial x_i} \right) \rangle}_{\Pi_{ij}}, \quad (6.2)$$

die sich aus Anwendung der Produktregel ergibt, schlägt LUMLEY (1975) die folgende Aufspaltung vor:

$$\tilde{\phi}_{ij} = \underbrace{\frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial}{\partial x_k}\langle\overline{u_k p''}\rangle}_{\mathcal{I}_{ij}} + \frac{1}{\rho_0}\left(\underbrace{\left\langle\overline{u_i'}\frac{\partial\overline{p''}}{\partial x_j}\right\rangle + \left\langle\overline{u_j'}\frac{\partial\overline{p''}}{\partial x_i}\right\rangle - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial}{\partial x_k}\langle\overline{u_k p''}\rangle}_{\phi_{ij}}\right). \quad (6.3)$$

\mathcal{I}_{ij} besitzt die Eigenschaft, ein isotroper Tensor zu sein, und ist ebenso wie \mathcal{T}_{ij}^p ein Transportterm. Dabei verändert ein isotroper Tensor seine Komponenten bei Rotation oder Translation des Koordinatensystems nicht (WYNGAARD, 2010, S. 313f) und ist damit unabhängig von der Richtung. ϕ_{ij} ist ebenso wie die Druck-Deformation Π_{ij} bei inkompressiblen Strömungen spurlos und wird als deviatorischer Term bezeichnet. Die Bezeichnung *deviatorisch* geht darauf zurück, dass ϕ_{ij} aus der Differenz $\tilde{\phi}_{ij} - \mathcal{I}_{ij}$ besteht und damit eine Abweichung (Deviation) von $\tilde{\phi}_{ij}$ darstellt. Da ϕ_{ij} spurlos ist, verteilt sie genauso wie Π_{ij} die TKE zwischen den einzelnen Komponenten um (siehe auch die Abschnitte 3.1.1 und 5.3).

Die Frage, welche Aufspaltung für die Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{ij}$ gewählt werden sollte, ist für die praktische Anwendung der Turbulenzmodellierung zentral und keineswegs rein akademischer Natur. Die Modellierung von $\tilde{\phi}_{ij}$ nach (6.2) unterscheidet sich von der Modellierung nach (6.3) im Wesentlichen in der Behandlung des jeweiligen Transportterms. \mathcal{I}_{ij} ist im Gegensatz zu \mathcal{T}_{ij}^p isotrop und wird daher auf Grund dieser differierenden Tensoreigenschaften unterschiedlich modelliert (LUMLEY, 1975). Die redistributiven Terme ϕ_{ij} und Π_{ij} sind beide spurlos und werden daher häufig mit denselben Modellen abgebildet (SPEZIALE, 1984). Die konkrete Modellierung von $\tilde{\phi}_{ij}$ hängt also entscheidend von der Wahl der Aufspaltung ab.

Als Entscheidungsgrundlage zur Verwendung von einer der zwei Aufspaltungen, lassen sich nur theoretische Argumente heranziehen. Der Grund dafür ist, dass die Druck-Kovarianzen nicht direkt messbar sind und daher Experimente nicht zur Beantwortung der Frage herangezogen werden können (LUMLEY, 1975; SPEZIALE, 1984). Für die Verwendung der auf LUMLEY (1975) basierenden Aufspaltung 6.3 in einen isotropen und einen deviatorischen Term spricht sich SPEZIALE (1984) aus. Er zeigt, dass die traditionelle Aufspaltung 6.2 im Grenzfall, dass eine Komponente der Geschwindigkeitsvarianz gegenüber den anderen beiden vernachlässigbar wird (z.B. bei starker Hintergrundrotation), inkonsistent zu den Navier-Stokes-Gleichungen ist. GROTH (1991) favorisiert jedoch die traditionelle Aufspaltung und führt aus, dass die Aufspaltung 6.3 nach LUMLEY (1975) bspw. bei Homogenität in einer Richtung zu unphysikalischen Szenarien führt. Letztlich lassen sich verschiedene Argumente sowohl für die eine als auch für die andere Aufspaltung auführen. Auch wenn die Frage danach, welche Zerlegung besser geeignet ist, nur mit theoretischen Argumenten und nicht mit den im Rahmen dieser Arbeit erzeugten LES-Daten beantwortet werden kann, ist es dennoch möglich, zunächst zu untersuchen, wie groß die Unterschiede zwischen den Aufspaltungen überhaupt sind.

Die Aufspaltung der Diagonalkomponenten $\tilde{\phi}_{11}$ und $\tilde{\phi}_{33}$ nach (6.2) und (6.3) ist für die bewölkten Grenzschichten in Abb. 6.7 dargestellt. Dabei werden in dieser und den noch folgenden Abbildungen die Terme mit umgekehrtem Vorzeichen so dargestellt, wie sie in den Impulsflussbilanzgleichungen (Gl. 3.12) auftauchen. Da aufgrund der horizontalen Homogenität $\mathcal{T}_{11}^p = 0$ gilt, ist $\Pi_{11} = -\tilde{\phi}_{11}$ (Abb. 6.7a,b). Die Aufspaltung nach (6.3) führt zu einem isotropen und einem deviatorischen Term, die bei BOMEX und DYCOMS beide in derselben Größenordnung liegen. Folglich ist also der Transportterm \mathcal{I}_{11} nicht vernachlässigbar. Ein Vergleich von Π_{11} und $-\phi_{11}$ zeigt für BOMEX, dass beide Terme ei-

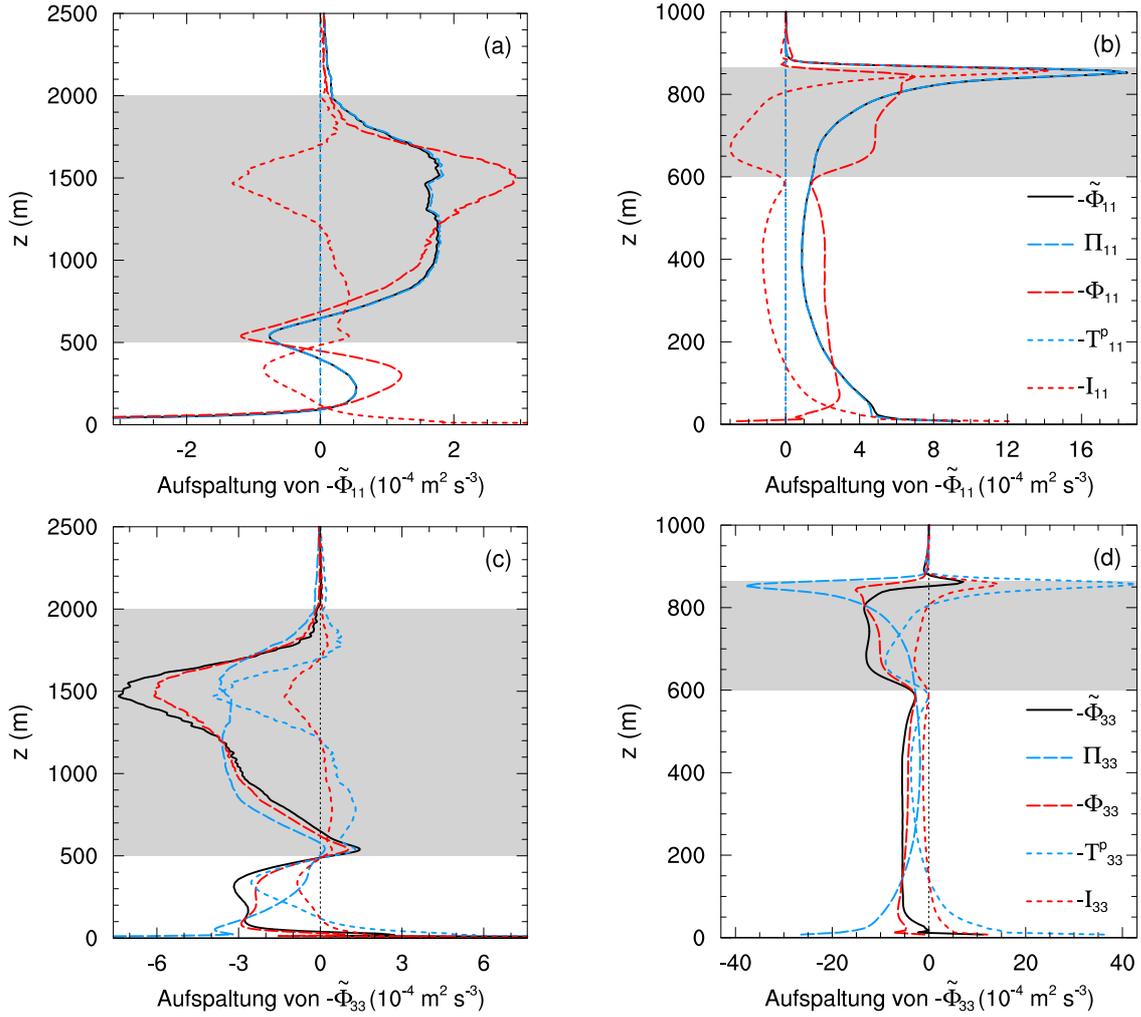


Abbildung 6.7: Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{11}$ nach Gln. 6.2 und 6.3 für BOMEX (a) und DYCOMS (b) sowie Aufspaltung von ϕ_{33} für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Die Vorzeichen der dargestellten Terme werden so verwendet, wie sie in der Impulsflussbilanzgleichung (Gl. 3.14) auftauchen. Blaue Linien zeigen die Terme der Zerlegung (6.2) und rote Linien die Terme der Zerlegung (6.3). Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

nen ähnlichen Verlauf aufweisen, wobei $-\phi_{11}$ ausgeprägtere Extrema innerhalb der Wolkenschicht und der trockenen Mischungsschicht aufweist (Abb. 6.7a). Bei DYCOMS zeigen die beiden redistributiven Terme ebenfalls einen ähnlichen Verlauf, der aber in der Nähe der Oberfläche und am Grenzschichtobertrand stärker voneinander abweicht. Die Aufspaltung von $\tilde{\phi}_{22}$ ist analog zu der von $\tilde{\phi}_{11}$ und wird daher nicht dargestellt.

Bei der Aufspaltung der vertikalen Komponente ϕ_{33} sind beide Transportterme ungleich Null und weisen über die gesamten Grenzschichten in etwa denselben Verlauf auf (Abb. 6.7c,d). Allerdings ist der isotrope Term \mathcal{I}_{33} betragsmäßig kleiner als \mathcal{T}_{33}^p . Dies hat zur Folge, dass $\phi_{33} \approx \tilde{\phi}_{33}$ ist. Die beiden spurlosen Terme Π_{33} und $-\phi_{33}$ weichen vom Verlauf her bei BOMEX und DYCOMS vor allem innerhalb der Wolkenschichten und in der Nähe der Oberfläche voneinander ab.

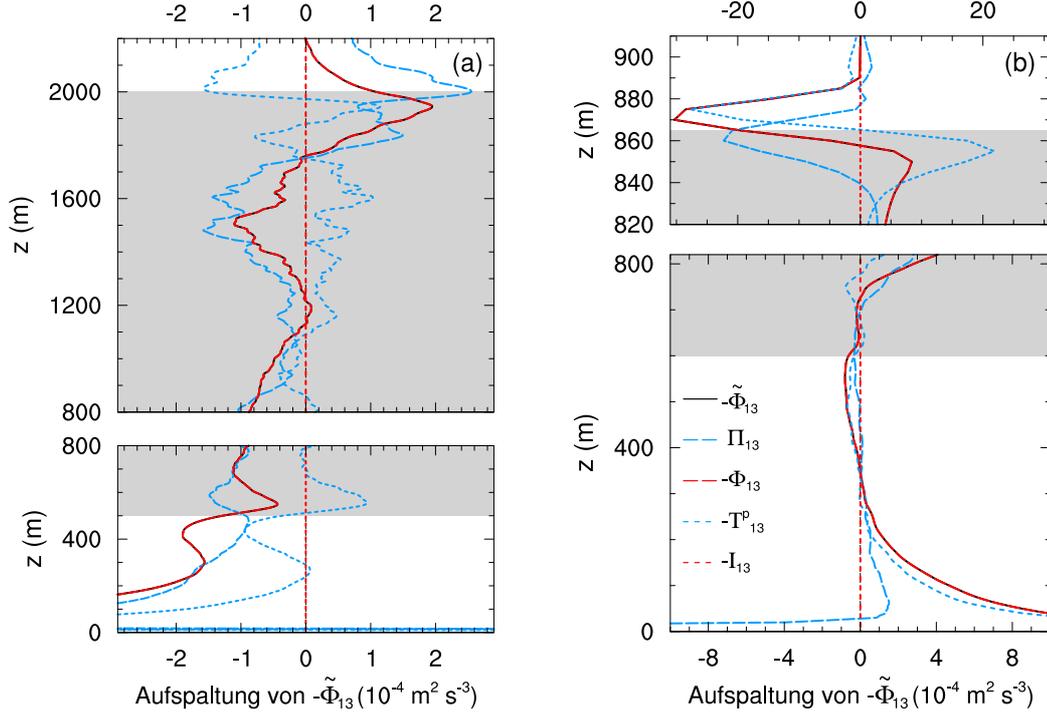


Abbildung 6.8: Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{13}$ nach Gln. 6.2 und 6.3 für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Die Vorzeichen der dargestellten Terme werden so verwendet, wie sie in der Impulsflussbilanzgleichung (Gl. 3.14) auftauchen. Blaue Linien zeigen die Terme der Zerlegung (6.2) und rote Linien die Terme der Zerlegung (6.3). In (b) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolken-schichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

Aus der in Abb. 6.8 dargestellten Aufspaltung der Nebendiagonalkomponente $\tilde{\phi}_{13}$ wird deutlich, dass für den isotropen Transportterm $\tilde{\mathcal{I}}_{13} = 0$ gilt. Daher ist $\phi_{13} = \tilde{\phi}_{13}$. Der Transportterm \mathcal{T}_{13}^p ist in derselben Größenordnung wie der redistributive Term Π_{13} (Abb. 6.8a,b) und daher auf keinen Fall bei der Modellierung vernachlässigbar. Die Verläufe von Π_{13} und ϕ_{13} unterscheiden sich vor allem in der Nähe der Oberfläche und am Oberrand der Grenzschichten, welches vornehmlich bei der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht auffällt (Abb. 6.8b). Die Aufspaltung der meridionalen Komponente $\tilde{\phi}_{23}$ verläuft analog zur Aufspaltung von $\tilde{\phi}_{13}$. Für die horizontale Komponente gilt $\tilde{\phi}_{12} = \phi_{12} = -\Pi_{12}$, da bei horizontaler Homogenität kein Netto-Transport in horizontaler Richtung erfolgt und somit $\mathcal{I}_{12} = \mathcal{T}_{12}^p = 0$ gilt. Der Verlauf von Π_{12} ist Abb. 5.12 zu entnehmen.

Die im vorherigen Abschnitt 6.2 erzielten Ergebnisse bezüglich der relativen Anteile aufgrund von Turbulenz, Scherung und Auftrieb an der Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianz Π_{ij} können auf die Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz ϕ_{ij} übertragen werden und werden daher nicht separat aufgezeigt.

Der Vergleich der traditionellen Aufspaltung von $\tilde{\phi}_{ij}$ mit der Aufspaltung in isotropen und deviatorischen Term zeigt, dass die Transportterme in den Komponenten, in denen sie ungleich Null sind, nicht vernachlässigbar sind und damit auch in vereinfachten Turbulenzparametrisierung berücksichtigt werden sollten. Die redistributiven Terme Π_{ij} und

ϕ_{ij} weisen im Kern der jeweiligen bewölkten Grenzschicht einen ähnlichen Verlauf auf, unterscheiden sich aber am Unter- und Oberrand teilweise erheblich. Dies bedeutet für die Modellierung dieser Terme, die häufig mit denselben Modellen beschrieben werden, dass je nach gewählter Aufspaltung andere Modellierungskonstanten verwendet werden sollten, um eine möglichst gute Übereinstimmung mit den LES-Daten zu erzielen (siehe auch Abschnitt 6.5.4).

6.4 Komponenten der Druck-Skalar-Kovarianzen

Abb. 6.9 enthält die verschiedenen Anteile der Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$ bzw. der Druck-Feuchte-Kovarianz $\Pi_{q 3}$ für die untersuchten bewölkten Grenzschichten. Dabei werden die Druck-Skalar-Kovarianzen mit einem negativen Vorzeichen dargestellt, um dasselbe Vorzeichen wie in den entsprechenden Bilanzgleichungen 3.17 u. 3.18 aufzuweisen. Ebenso wie die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen wirken auch die Druck-Skalar-Kovarianzen ausgleichend auf die Strömung und versuchen die Turbulenz in einen isotropen Zustand zu überführen, indem sie zwischen vertikalen und horizontalen Flüssen umverteilen. Die Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$ ist im Inversionsbereich bei BOMEX eine und bei DYCOMS zwei Größenordnungen größer als in der restlichen Grenzschicht (Abb. 6.9a,b), weshalb sich die Skalierungen vom unteren zum oberen Teil der Grenzschichten unterscheiden. Markant ist bei beiden bewölkten Grenzschichten, dass die totale Kovarianz im Inversionsbereich vom Auftriebsanteil $\Pi_{\theta 3}^B$ dominiert wird und die übrigen Komponenten nur einen sehr geringen Anteil ausmachen. Dies hängt damit zusammen, dass im Inversionsbereich von BOMEX und DYCOMS die Auftriebsproduktion $\mathcal{B}_{\theta 3}$ den maßgeblichen Produktionsmechanismus für den vertikalen Temperaturfluss darstellt, welcher dann von der Druck-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$ direkt ausgeglichen wird (siehe Abb. 5.14a,b). Somit verteilt die totale Kovarianz im Inversionsbereich hauptsächlich den durch Auftrieb erzeugten Fluss um und wird daher auch vornehmlich vom Auftriebsanteil bestimmt. Im unteren Bereich der Wolkenschichten und im trockenen Bereich der Grenzschichten sind der turbulente Anteil und der Anteil aufgrund von Auftrieb in derselben Größenordnung. Der Scherungsanteil $\Pi_{\theta 3}^S$ ist selbst in der oberflächennahen Schicht gegenüber $\Pi_{\theta 3}^T$ und $\Pi_{\theta 3}^B$ vernachlässigbar. Hier macht sich bemerkbar, dass der vertikale Fluss nicht direkt durch Scherung erzeugt werden kann, da $\mathcal{G}_{\theta 3}^u = 0$ gilt, und somit auch kein Ausgleich über die Druck-Skalar-Kovarianz erfolgt. Dass der Scherungsanteil $\Pi_{\theta 3}^S$ allerdings ungleich Null ist, geht darauf zurück, dass $\Pi_{\theta 3}^S$ nur über Umverteilung von den horizontalen Komponenten eingebracht wird. Auch der Anteil $\Pi_{\theta 3}^{SG}$, der vom Subskalenmodell herrührt, ist verschwindend gering.

Die sich für $\Pi_{\theta 3}$ ergebende Zerlegung stellt sich genauso für $\Pi_{q 3}$ ein (Abb. 6.9c,d). Die konkreten Verläufe der Anteile von $\Pi_{\theta 3}$ und $\Pi_{q 3}$ unterscheiden sich im gleichen Maße wie die Verläufe der gesamten Kovarianzen voneinander. Dies geht, wie in Abschnitt 5.5 beschrieben wird, darauf zurück, dass die mittleren Gradienten von $\langle \bar{\theta}_1 \rangle$ und $\langle \bar{q} \rangle$ unterschiedliche Vorzeichen aufweisen und sich dementsprechend auch die Bilanzterme einstellen. Die Dominanz des Auftriebsanteils der vertikalen Druck-Skalar-Kovarianzen im Inversionsbereich wird auch für trockene konvektive Grenzschichten beobachtet (siehe Abb. 6.3 und MOENG und WYNGAARD (1986)).

Die in Abb. 6.10 dargestellten horizontalen Druck-Kovarianzen $\Pi_{\theta 1}$ und $\Pi_{q 1}$ setzen sich bei BOMEX und DYCOMS zu ungefähr gleichen Teilen aus turbulentem, Scherungs- und Auftriebsanteil zusammen, wobei in der Nähe der Oberfläche der Scherungsanteil dominiert. Dass auch in den horizontalen Druck-Kovarianzen signifikante Auftriebsanteile vorhanden sind, hängt mit der generellen Wirkung der Druck-Skalar-Kovarianz zusammen,

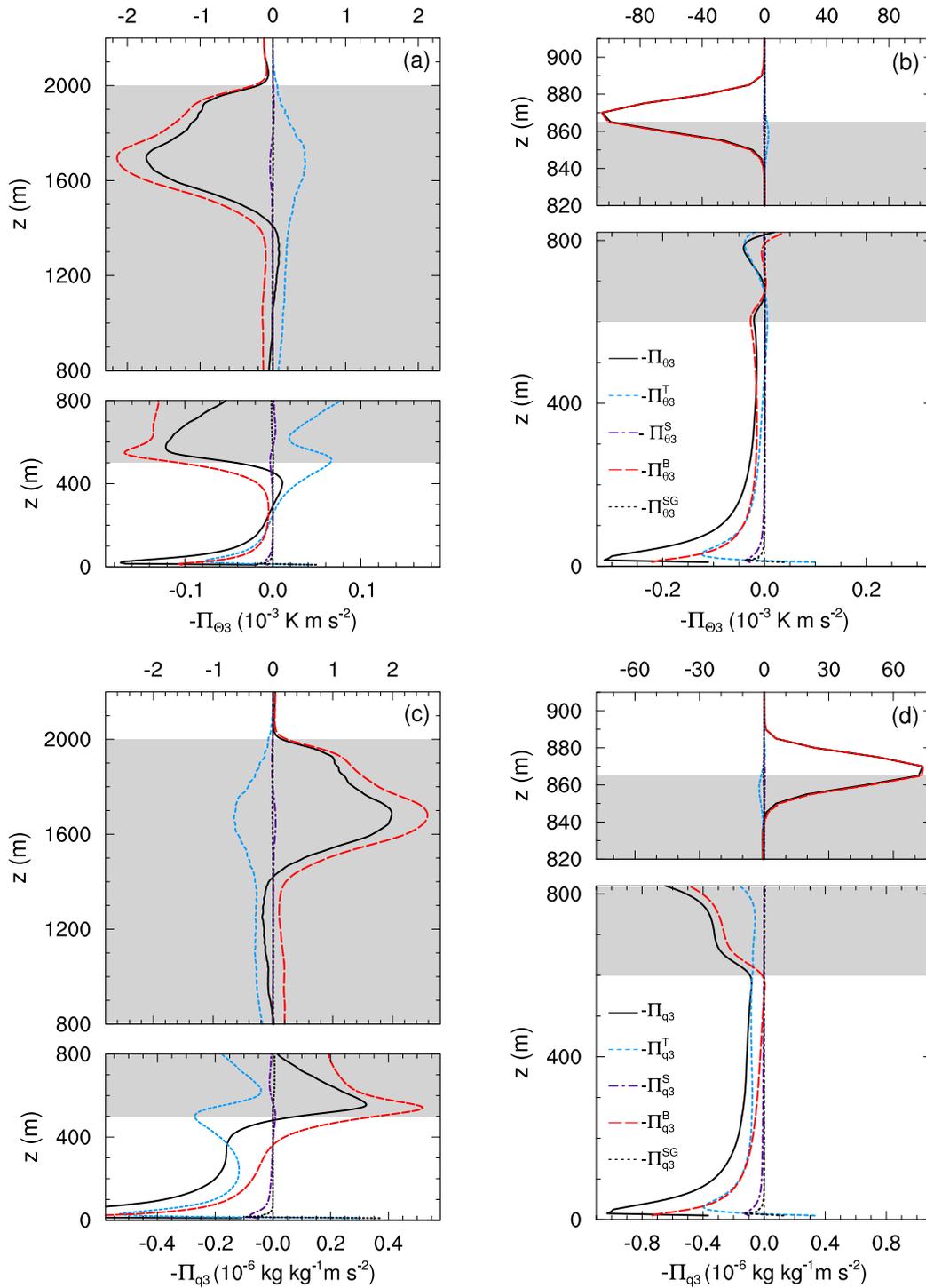


Abbildung 6.9: Vertikalprofile der Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}$ für BOMEX (a) und DYCOMS (b) sowie der Druck-Feuchte-Kovarianz $\Pi_{q 3}$ für BOMEX (c) und DYCOMS (d) mit ihren jeweiligen Anteilen aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb und Subskalenmodell. Die Vorzeichen der dargestellten Terme werden so verwendet, wie sie in den Bilanzen der skalaren Flüsse (Gln. 3.17 u. 3.18) auftauchen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In allen Teilabbildungen unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolken- und der Grenzschicht gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

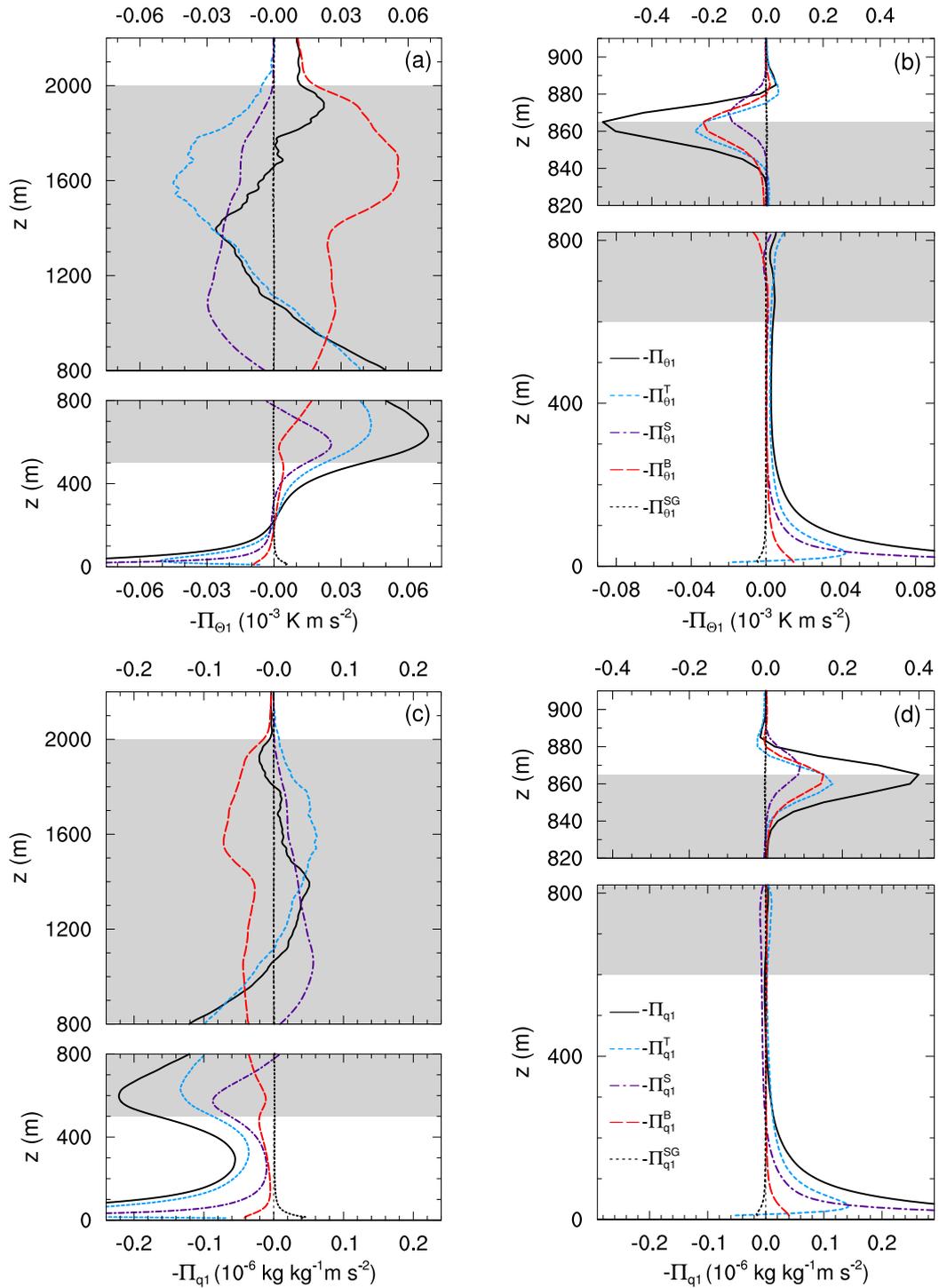


Abbildung 6.10: Vertikalprofile der Druck-Temperatur-Kovarianz Π_{θ_1} für BOMEX (a) und DYCOMS (b) sowie der Druck-Feuchte-Kovarianz Π_{q_1} für BOMEX (c) und DYCOMS (d) mit ihren jeweiligen Anteilen aufgrund von Turbulenz, Scherung, Auftrieb und Subskalenmodell. Die Vorzeichen der dargestellten Terme werden so verwendet, wie sie in den Bilanzen der skalaren Flüsse (Gln. 3.17 u. 3.18) auftauchen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. In (b) und (d) unterscheidet sich die Skalierung der Abszisse vom unteren und oberen Teil der Grenzschicht. Die Ordinaten sind im Bereich der oberen Wolkenstichten gestreckt. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

welche die in den vertikalen Komponenten durch Auftrieb erzeugten Flüsse in die horizontalen Komponenten umverteilt. Die subskaligen Anteile sind bei BOMEX und DYCOMS sehr klein. Die nicht dargestellte Zerlegung von $\Pi_{\theta 2}$ und $\Pi_{q 2}$ ergibt sich analog zu der Zerlegung der soeben diskutierten zonalen Komponenten $\Pi_{\theta 1}$ und $\Pi_{q 1}$.

Die Druck-Skalar-Kovarianzen werden in der vertikalen Komponente insbesondere im Inversionsbereich vom Auftrieb dominiert, da dieser Prozess direkt in vertikaler Richtung wirkt. Der Scherungsanteil ist dort maximal, wo große Geschwindigkeitsgradienten auftreten. Dies ist vor allem in den horizontalen Komponenten von $\Pi_{\theta i}$ und $\Pi_{q i}$ in der Nähe der Oberfläche der Fall. Hieran verdeutlicht sich einmal mehr die anisotrope Wirkung von Auftrieb und Scherung. Die turbulenten Interaktionen wirken dreidimensional und somit ist der turbulente Anteil in allen drei Komponenten der Druck-Skalar-Kovarianz von Bedeutung. Die Zerlegung der beiden skalaren Druck-Kovarianzen $\Pi_{\theta i}$ und $\Pi_{q i}$ stellt sich in analoger Weise ein, welches sich auf das entsprechende Verhalten der Bilanzen von Temperatur- und Feuchteflüssen zurückführen lässt. Daher wird im folgenden Abschnitt 6.5, in dem es um die Überprüfung von Modellen für die Druck-Kovarianzen geht, allgemein von *Druck-Skalar-Kovarianzen* Π_{si} gesprochen. Dabei steht \bar{s} stellvertretend für die Skalare $\bar{\theta}_1$ und \bar{q} .

6.5 Überprüfung existierender Modelle für die Kovarianzen

Nachfolgend werden gängige Parametrisierungen für die Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen mit Hilfe der LES-Daten bewölkter Grenzschichten verglichen und darüber Werte empirischer Modellierungskonstanten abgeleitet. Die Untersuchung konzentriert sich auf die redistributiven Anteile von $\tilde{\phi}_{ij}$, welches Π_{ij} und ϕ_{ij} sind, da diese einen größeren Anteil an der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{ij}$ als die Transportterme besitzen (siehe Abschnitt 6.3). Außerdem werden die Transportterme oft in vereinfachten Turbulenzparametrisierungen zweiter Ordnung, die häufig in der Wettervorhersage zum Einsatz kommen, vernachlässigt (MIRONOV, 2009, S. 171) und deshalb im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht. Zur Überprüfung der Modelle mit den LES-Daten wird zunächst die traditionelle Zerlegung Π_{ij} verwendet und diese dann in Abschnitt 6.5.4 mit dem deviatorischen Term ϕ_{ij} verglichen. Da sowohl Π_{ij} also auch ϕ_{ij} spurlos und damit redistributiv sind, werden in der Regel für beide Terme dieselben Modelle verwendet. Daher wird bei der Vorstellung der Parametrisierungen nicht explizit zwischen Π_{ij} und ϕ_{ij} unterschieden.

Wie die Untersuchung der einzelnen Anteile von Π_{ij} und Π_{si} in Abschnitt 6.2 und 6.4 für die bewölkten Grenzschichten zeigt, sind die Beiträge aufgrund von turbulenten Interaktionen Π_{ij}^T und Π_{si}^T , Scherung Π_{ij}^S und Π_{si}^S und Auftrieb Π_{ij}^B und Π_{si}^B die maßgeblichen Anteile. Daher werden genau für diese Anteile diverse Modelle mit den LES-Daten verglichen. Dabei wird für die Druck-Kovarianzen häufig das auf ROTTA (1951) und LAUNDER *et al.* (1975) beruhende, sog. *Basismodell* verwendet. Das Basismodell ist abgesehen von der Formulierung für den turbulenten Anteil linear in den Momenten zweiter Ordnung. Da es häufig in geophysikalischen Modellen zum Einsatz kommt (z.B. ZEMAN, 1981; UMLAUF und BURCHARD, 2005), wird es in dieser Arbeit mit den LES-Daten überprüft.

Wie in den folgenden Abschnitten noch ausführlicher beschrieben wird, enthält das Basismodell für die Druck-Kovarianzen empirische Modellierungskonstanten, deren Werte durch Anpassung an Messungen oder Ergebnisse von turbulenzauflösenden Simulationen bestimmt werden können. Auch für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten bewölk-

ten Grenzschichten sollen Werte für die Konstanten ermittelt und mit den in der Literatur angegebenen Werten verglichen werden. Dazu wird die Parametrisierung so an die LES-Daten angepasst, dass die Summe der quadratischen Abweichungen zwischen LES-Daten und Parametrisierung minimal wird (*Methode der kleinsten Quadrate*). Zum Einsatz kommt dafür die lineare Regression. Die in dieser Arbeit zu untersuchenden Parametrisierungen des Basismodells bestehen alle aus einem Produkt einer Modellierungskonstanten c mit einer Funktion $f(z)$, die nur von der Höhe z abhängt. Dieses Modell soll an die aus den LES-Daten abgeleiteten Druck-Kovarianzen, die nachfolgend allgemein mit $\Pi_{\text{LES}}(z)$ bezeichnet werden, angepasst werden, sodass $\Pi_{\text{LES}}(z) = c \cdot f(z)$ gilt. Wird diese Beziehung zu $\Pi_{\text{LES}}(z)/f(z) = c$ umgeformt, kann die Konstante c über lineare Regression zu $c = \langle \Pi_{\text{LES}}(z)/f(z) \rangle_z$ bestimmt werden (z.B. SCHÖNWIESE, 2006, S. 168f). Dabei bezeichnet $\langle \cdot \cdot \rangle_z$ das Mittel über alle Höhen z . Somit ergibt sich der Wert der optimalen Konstanten, welche die Abweichung von LES-Daten und Parametrisierung minimiert, als Mittel vom Quotienten aus LES-Daten und Parametrisierung. Die zum Mittelwert gehörige Standardabweichung wird bestimmt, um einen Eindruck über die Streuung der Werte um die optimale Konstante zu erhalten. Die Anpassung erfolgt nicht über die gesamte Grenzschicht, sondern nur über den Kern der jeweiligen Grenzschichten, welcher zu $100 \text{ m} < z < 2000 \text{ m}$ für BOMEX und $100 \text{ m} < z < 800 \text{ m}$ für DYCOMS gewählt wurde. Die oberflächennahen Schichten und die Inversionsbereiche bleiben folglich unberücksichtigt. Der Grund dafür ist zum einen, dass die LES-Daten in diesen Bereichen stärker vom Subskalenmodell bestimmt werden und damit weniger belastbar sind. Zum anderen weisen die Druck-Kovarianzen in diesen Bereichen häufig Extrema auf, die die Modelle konstruktionsbedingt weniger gut wiedergeben können und damit eine Anpassung auch für diese Bereiche nur eingeschränkt sinnvoll ist. Zusätzlich zur Einschränkung des Höhenintervalls wird noch eine weitere Selektion bei der Mittelbildung zur Bestimmung der Konstante vorgenommen, um den Einfluss von Ausreißerwerten auf das Mittel abzufangen. Es gehen nur Werte ins Mittel ein, die innerhalb eines gewissen Wertebereichs um den jeweils aus der Literatur bestimmten, theoretischen Wert der Modellierungskonstante liegen. Dabei wird dieser Bereich zu ± 5 um den jeweils theoretischen Wert der dimensionslosen Modellierungskonstante gewählt. Die Beschränkung zur Anpassung der Konstanten auf den jeweiligen Kern der Grenzschichten und einen gewissen Wertebereich ist willkürlich. Daher hängen auch die konkret angepassten Konstanten zu einem gewissen Maße von dieser Wahl ab. Dennoch liefert diese Methode einen Anhaltspunkt dafür, ob und inwiefern die Konstanten bei der Modellierung mit dem Basismodell bei Vorhandensein von Bewölkung angepasst werden sollten. Durch diese Vorgehensweise kann die ermittelte Konstante außerdem nicht für alle Höhenbereiche immer den optimalen Wert in dem Sinne liefern, dass sie die beste Übereinstimmung mit den LES-Daten ergibt.

Über das Basismodell hinaus existieren viele weitere Modelle für die Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen, die in der Regel nicht-lineare Terme beinhalten. Eine Übersicht geben z.B. HANJALIĆ und LAUNDER (2011). Als ein Beispiel dieser Modelle wird zusätzlich zum Basismodell für den turbulenten Anteil und den Auftriebsanteil das von CRAFT *et al.* (1996) entwickelte, nicht-lineare Modell mit den LES-Daten verglichen. Dieser Ansatz hat sich für viele Anwendungen gegenüber anderen nicht-linearen Ansätzen als überlegen erwiesen (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 98). Dabei basiert dieser Ansatz auf einer Idee von LUMLEY (1978), die besagt, dass, wenn die Geschwindigkeitsvarianzen in einer Komponente gegen Null gehen auch die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen in dieser Richtung verschwinden sollten (CRAFT und LAUNDER, 2001). Damit wird sichergestellt, dass dieses Modell zusätzlich zu den Anforderungen nach Erfüllung von kor-

rekten Tensoreigenschaften, physikalischen Einheiten und Symmetrien, auch realisierbar ist. Dabei gewährleistet ein realisierbares Modell bspw., dass Geschwindigkeitsvarianzen immer positiv bleiben oder aber Korrelationskoeffizienten nicht größer als Eins werden können (siehe Abschnitt 1.3). Der Grenzfall, den Turbulenz erreicht, wenn die Geschwindigkeitsvarianz in einer Richtung (und damit auch der skalare Fluss in dieser Richtung) verschwindet, wird als Zwei-Komponenten-Grenzfall (engl. *Two-Component-Limit*, *TCL*) bezeichnet. Daher wird das auf CRAFT *et al.* (1996) beruhende Modell auch TCL-Modell genannt. Dieser Grenzfall kann bei atmosphärischer Turbulenz in der Nähe fester Oberflächen wie dem Boden oder aber in stark stabilen Schichten eintreten, da in diesen Bereichen die horizontalen Geschwindigkeitsvarianzen gegenüber der vertikalen Varianz dominieren (ZEMAN, 1981).

Da die generelle Wirkung der Druck-Kovarianzen darin besteht, die Anisotropie einer turbulenten Strömung zu reduzieren, geht sowohl in das Basismodell als auch in das TCL-Modell der dimensionslose Tensor

$$a_{ij} = \frac{\langle \bar{u}_i'' \bar{u}_j'' \rangle + \langle \tau_{ij} \rangle}{E} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (6.4)$$

ein. Er gibt die Abweichung des Impulsflusstensors vom isotropen Zustand an und ist damit ein Maß für die Anisotropie einer Strömung. a_{ij} wird daher im Englischen auch als *departure-from-isotropy* Tensor bezeichnet. Die Variable

$$E = \frac{1}{2} \langle \bar{u}_i''^2 \rangle + \langle e \rangle \quad (6.5)$$

steht für die totale turbulente kinetische Energie TKE.

Nachfolgend werden zunächst in Abschnitt 6.5.1 Parametrisierungen für den Anteil an den Druck-Kovarianzen mit LES-Daten verglichen, der sich aufgrund von turbulenten Interaktionen einstellt. Anschließend werden Modelle für Scherungs- (Abschnitt 6.5.2) und Auftriebsanteil (Abschnitt 6.5.3) behandelt. In Abschnitt 6.5.4 wird Bezug zur Wahl der Aufspaltung der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz genommen. Da sich die Zerlegung von Π_{θ_i} und Π_{q_i} in analoger Weise einstellt, werden auch die Parametrisierungen der Druck-Skalar-Kovarianzen Π_{s_i} nur am Beispiel der Druck-Temperatur-Kovarianzen diskutiert und die Druck-Feuchte-Kovarianzen nicht separat behandelt.

6.5.1 Anteil durch turbulente Interaktionen

Die für den turbulenten Anteil der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{ij}^T im Basismodell verwendete Parametrisierung geht auf ROTTA (1951) zurück. Er nimmt an, dass die Rückkehr von Turbulenz in ihren isotropen Zustand proportional zum Grad der Anisotropie verläuft, sodass

$$\Pi_{ij}^T = -\frac{C_T^u}{\tau_E} a_{ij} E. \quad (6.6)$$

gilt. C_T^u ist eine dimensionslose Modellierungskonstante und $\tau_E = E/\langle \epsilon \rangle$ bezeichnet die Dissipationszeitskala der TKE (vgl. POPE, 2000, S. 423). Ursprünglich geht nicht τ_E sondern eine sog. *return-to-isotropy* Zeitskala in (6.6) ein. Es wird allerdings üblicherweise angenommen, dass beide Zeitskalen proportional zueinander sind (MIRONOV, 2001). Werte für C_T^u werden empirisch bestimmt und sind demnach abhängig von den konkret untersuchten Situationen. HANJALIĆ und LAUNDER (2011, S. 67) geben einen Wertebereich von $1.5 < C_T^u < 1.8$ an, wobei der konkret verwendete Wert u.a. auch davon abhängt,

welche Parametrisierung für den Scherungsanteil Π_{ij}^S benutzt wird. Basierend auf Auswertungen von atmosphärischen Grenzschichtsimulationen, ermittelt ZEMAN (1981) einen Wertebereich von $1 \leq C_T^u \leq 3$.

Die von ROTTA (1951) beschriebene Vorgehensweise wird von MONIN (1965) auf den turbulenten Anteil der Druck-Skalar-Kovarianz übertragen, woraus

$$\Pi_{si}^T = \frac{C_T}{\tau_E} (\langle \overline{u_i'' \overline{s}''} \rangle + \langle \tau_{si} \rangle). \quad (6.7)$$

folgt. Die durch turbulente Interaktionen erzeugte Druck-Skalar-Kovarianz ist demnach proportional zum Skalarfluss. Auch in (6.7) geht ursprünglich die *return-to-isotropy* Zeitskala für Skalare ein, von der aber angenommen wird, dass sie proportional zur Dissipationszeitskala τ_E ist (MIRONOV, 2009, S. 170). Die Konstante C_T liegt nach ZEMAN (1981) in einem Wertebereich von $3 \leq C_T \leq 5$. Dabei ermittelt MIRONOV (2001) für die konvektive atmosphärische Grenzschicht einen optimalen Wert von $C_T = 3.0$.

Komplexere Modelle für Π_{ij}^T verwenden häufig nicht-lineare Ausdrücke für die Druck-Kovarianzen, deren Koeffizienten Funktionen von Invarianten des *departure-from-isotropy* Tensors a_{ij} sind (LUMLEY, 1978). Das auf dem Zwei-Komponenten-Grenzfall basierende, nicht-lineare TCL-Modell nach CRAFT *et al.* (1996) verwendet für den turbulenten Anteil der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz

$$\Pi_{ij}^T = -\frac{C_{T1}^u}{\tau_E} \left[a_{ij} + C_{T2}^u \left(a_{ik} a_{jk} - \frac{1}{3} A_2 \delta_{ij} \right) \right] E. \quad (6.8)$$

$C_{T1}^u = \left(3.75 A_2^{1/2} + 1 \right) A$ und $C_{T2}^u = 0.7$ sind dimensionslose Koeffizienten. $A_2 = a_{ij} a_{ji}$ und $A_3 = a_{ij} a_{jk} a_{ki}$ sind Invarianten von a_{ij} . A wird als *Flatness-Parameter* bezeichnet, der über $A = 1 - 9/8 (A_2 - A_3)$ definiert ist und im Zwei-Komponenten-Grenzfall verschwindet (LUMLEY, 1978). Die Invarianten eines symmetrischen Tensors sind die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms dieses Tensors und ändern ihren Wert bspw. bei Drehung des Koordinatensystems nicht (vgl. z.B. POPE, 2000, S. 666). Werden (6.6) und (6.8) verglichen, zeigt sich, dass das TCL-Modell eine Erweiterung von Rottas Formulierung ist.

Das TCL-Modell für die Druck-Skalar-Kovarianz Π_{si}^T lautet (CRAFT *et al.*, 1996)

$$\begin{aligned} \Pi_{si}^T &= C_{T1} \frac{R^{1/2}}{\tau_E} [(\langle \overline{u_i'' \overline{s}''} \rangle + \langle \tau_{si} \rangle) (1 + C_{T2} A_2) + C_{T3} a_{ij} (\langle \overline{u_j'' \overline{s}''} \rangle + \langle \tau_{sj} \rangle)] \\ &+ C_{T1} \frac{R^{1/2}}{\tau_E} [C_{T4} a_{ij} a_{jk} (\langle \overline{u_k'' \overline{s}''} \rangle + \langle \tau_{sk} \rangle)] + C_{T5} R E a_{ij} \frac{\partial \langle \overline{s} \rangle}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Für die dimensionslosen Koeffizienten gilt $C_{T1} = 1.7 \left[1 + 1.2 (A_2 A)^{1/2} \right]$, $C_{T2} = 0.6$, $C_{T3} = -0.8$, $C_{T4} = 1.1$ und $C_{T5} = 0.2 A^{1/2}$. $R = \tau_E / \tau_s$ ist der Quotient der Zeitskalen, wobei $\tau_s = (\langle \overline{s}''^2 \rangle + \langle \varsigma \rangle) / \langle \epsilon_s \rangle$ die Dissipationszeitskala der skalaren Varianz darstellt. Dabei bezeichnet ς die subskalige skalare Varianz und ϵ_s die Dissipationsrate der skalaren Varianz (siehe auch Gln. A.7 und A.8).

In die soeben vorgestellten Formulierungen nach ROTTA (1951) und CRAFT *et al.* (1996) fließen die Dissipationszeitskalen

$$\tau_E = \frac{E}{\langle \epsilon \rangle}, \quad \tau_\theta = \frac{\langle \overline{\theta_1''^2} \rangle + \langle \vartheta \rangle}{\langle \epsilon_\theta \rangle} \quad \text{und} \quad \tau_q = \frac{\langle \overline{q''^2} \rangle + \langle \kappa \rangle}{\langle \epsilon_q \rangle} \quad (6.10)$$

ein, die in Abb. 6.11 dargestellt werden. Dabei wird zur Berechnung der Dissipationszeitskala der TKE die mittels der Residuenmethode bestimmte Dissipationsrate $\langle \epsilon \rangle = \mathcal{D}_{TKE}^{re}$

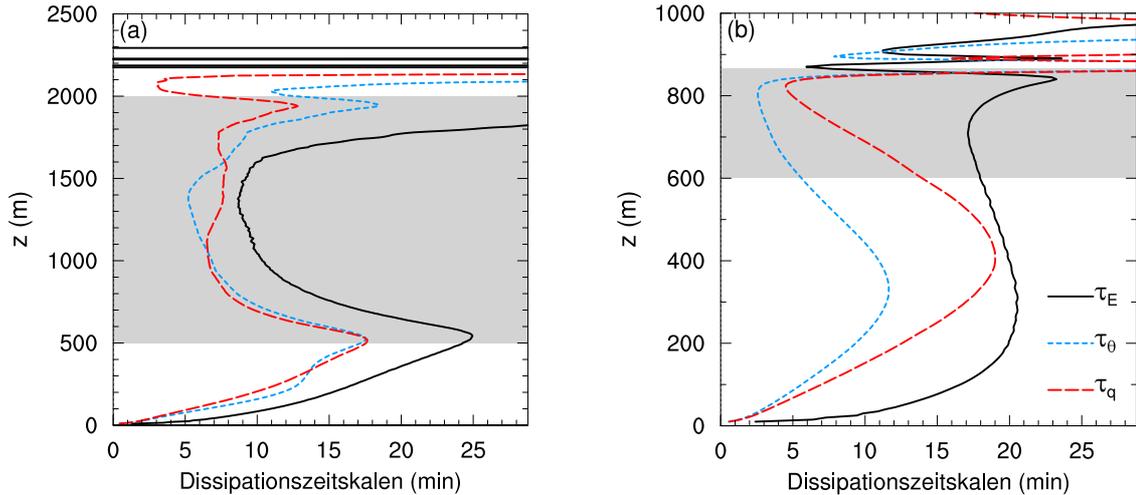


Abbildung 6.11: Vertikalprofile der Dissipationszeitskalen τ_E , τ_θ und τ_q für BOMEX (a) und DYCOMS (b) in Minuten (min). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

verwendet (siehe auch Abschnitt 5.1.2). Bei BOMEX sind die drei Dissipationszeitskalen bis zum Oberrand der Kumulusschicht nahezu proportional zueinander (Abb. 6.11a). Sie nehmen bis zum Oberrand der trockenen Mischungsschicht ($z = 500$ m) mit der Höhe zu, gehen in der feucht-labilen Schicht leicht zurück und nehmen in der stabilen Schicht ($z > 1500$ m) wieder zu. Bei DYCOMS ist zwar keine direkte Proportionalität der Zeitskalen gegeben, aber die Dissipationszeitskalen weisen ähnliche Verläufe auf (Abb. 6.11b). Die Zeitskalen nehmen bis ca. in die Mitte der Grenzschicht mit der Höhe zu und darüber wieder ab. τ_E weist am Oberrand der Stratokumulusschicht ein Maximum und τ_θ sowie τ_q Minima auf. Der abweichende Verlauf von τ_E im Vergleich zu τ_θ sowie τ_q für $z > 700$ m ist möglicherweise damit verbunden, dass die skalaren Dissipationsraten am Oberrand der Stratokumulusschicht unterschätzt werden (siehe Abschnitt 5.6) und somit auch die Zeitskalen der skalaren Varianzen davon beeinflusst werden. Daher sollte dieser Bereich nur eingeschränkt interpretiert werden. Oberhalb der Wolkenschichten schwanken die Zeitskalen bei BOMEX und DYCOMS sehr stark. In diesem Bereich liegt ein Auswertungsproblem vor, da die Varianzen und die Dissipationsraten dort sehr klein werden und daher der Quotient aus beiden erratische Werte aufweist. Folglich lässt sich dieser Bereich nicht zur Auswertung hinzuziehen.

Bei der Mehrheit der Schließungen zweiter Ordnung wird angenommen, dass die verschiedenen Zeitskalen proportional zueinander sind (MIRONOV *et al.*, 2000). Mit dieser Annahme ist die Verwendung einer Zeitskala zur Beschreibung der Prozesse ausreichend, weil die übrigen Zeitskalen auf die verwendete Zeitskala zurückgeführt werden können. Die soeben beschriebenen Ergebnisse zeigen, dass die Annahme der Proportionalität nur für die Kumulus-bedeckte Grenzschicht gilt und eine legitime Annahme ist, aber weniger Gültigkeit bei der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht aufweist.

Abb. 6.12 enthält beispielhaft drei Komponenten des turbulenten Anteils Π_{ij}^T und die Parametrisierungen nach (6.6) und (6.8). Dabei wurde für die Parametrisierung (6.6) zum einen mit $C_T^u = 2.0$ eine Konstante angenommen, die innerhalb des von ZEMAN (1981) angegebenen Bereichs von $1 \leq C_T^u \leq 3$ liegt. Zum anderen wird (6.6) in Abb. 6.12 zusätzlich mit der über lineare Regression angepassten Konstante dargestellt. MIRONOV (2001) fol-

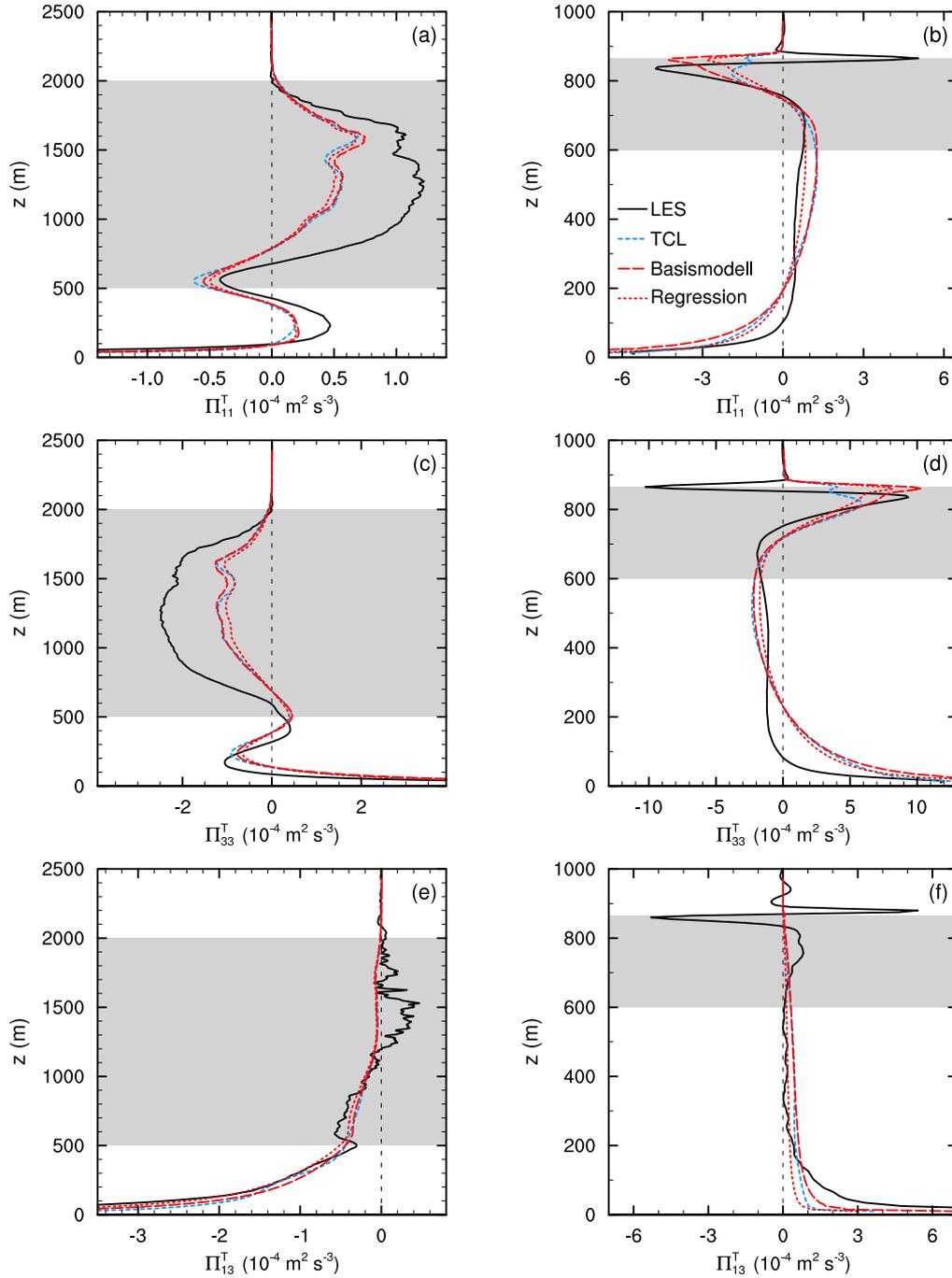


Abbildung 6.12: Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{11}^T für BOMEX (a) und DYCOMS (b), Π_{33}^T für BOMEX (c) und DYCOMS (d) sowie Π_{13}^T für BOMEX (e) und DYCOMS (f). Schwarze Linien zeigen Π_{11}^T , Π_{33}^T und Π_{13}^T aus den LES-Daten, blaue Linien die auf CRAFT *et al.* (1996) basierende TCL-Parametrisierung (6.8) und rote Linien die auf ROTTA (1951) basierende Formulierung (6.6) des Basismodells, wobei die lang gestrichelten, roten Linien mit $C_T^u = 2.0$ bestimmt wurden und die kurz gestrichelten, roten Linien die über lineare Regression angepasste Formulierung darstellen. Die über Regression ermittelte Konstante C_T^u des Basismodells wurde in (a) zu $C_T^u = 1.81$, in (b) zu $C_T^u = 1.33$, in (c) zu $C_T^u = 1.67$ in (d) zu $C_T^u = 1.59$, in (e) zu $C_T^u = 2.32$ und in (f) zu $C_T^u = 0.87$ bestimmt (siehe auch Tab. 6.1). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

	Π_{11}^T	Π_{22}^T	Π_{33}^T	Π_{12}^T	Π_{13}^T	Π_{23}^T	Lit.
C_T^u (B)	1.81±1.08	1.99±1.55	1.67±1.30	1.29±1.37	2.32±1.23	2.38±1.47	1–3
C_T^u (D)	1.33±0.78	1.72±1.08	1.59±0.94	1.13±0.66	0.87±0.70	2.57±0.28	
	$\Pi_{\theta 1}^T$	$\Pi_{\theta 2}^T$	$\Pi_{\theta 3}^T$	$\Pi_{q 1}^T$	$\Pi_{q 2}^T$	$\Pi_{q 3}^T$	Lit.
C_T (B)	1.66±1.45	1.44±1.23	4.26±1.54	1.75±1.31	1.31±1.08	4.13±1.30	3–5
C_T (D)	3.50±2.38	3.89±1.42	3.25±2.29	1.45±0.86	1.11±0.62	2.86±0.64	

Tabelle 6.1: Werte der an die LES-Daten angepassten Modellierungskonstanten C_T^u und C_T mit ihren Standardabweichungen für BOMEX (B) und DYCOMS (D). Es handelt sich um die Konstanten der auf ROTTA (1951) basierenden Parametrisierungen 6.6 und 6.7 des Basismodells. Zur Anpassung wurde lineare Regression verwendet. Die Literaturwerte (Lit.) entstammen ZEMAN (1981).

gend wird der subskalige Anteil \mathcal{P}_{ij} der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz zum turbulenten Anteil Π_{ij}^T addiert und in Abb. 6.12 dargestellt. Nachfolgend bezeichnet daher Π_{ij}^T die Summe aus aufgelöstem und subskaligem Anteil.

Abb. 6.12 zeigt, dass sich die Rotta-Parametrisierung (6.6) des Basismodells und das TCL-Modell (6.8) für alle dargestellten Komponenten kaum unterscheiden und beide Formulierungen über weite Teile der Grenzschichten den funktionalen Verlauf der LES-Daten qualitativ wiedergeben können. Allerdings unterschätzen die Parametrisierungen bei BOMEX in den Diagonalkomponenten die Druck-Kovarianz innerhalb der Kumulusschicht (Abb. 6.12a,c). Auch bei DYCOMS haben die Parametrisierungen am Grenzschichtoberrand Probleme. Dort können sie die auftretenden Maxima und Minima nur teilweise (Abb. 6.12b,d) bzw. überhaupt nicht (Abb. 6.12f) wiedergeben. Die sich aus linearer Regression ergebenden Werte für die Konstante C_T^u sowie ihre Standardabweichungen sind in Tab. 6.1 zusammengefasst. Sie liegen unter Einbeziehung der Standardabweichungen alle innerhalb des von ZEMAN (1981) angegebenen Bereichs von $1 \leq C_T^u \leq 3$. Tab. 6.1 ist ferner zu entnehmen, dass sich die angepassten Konstanten für die verschiedenen Komponenten der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz und die zwei bewölkten Grenzschichten unterscheiden und daher die Verwendung desselben Wertes für die Konstante in allen Komponenten und Fällen nicht zur optimalen Anpassung an die LES-Daten führt. Allerdings ist der Wertebereich der Konstanten relativ klein, sodass durch die Verwendung einer nicht optimal angepassten Konstante in einer Komponente nur geringfügig zusätzliche Fehler, die ohnehin durch die Modellierung entstehen, auftreten.

Als Beispiel für die Druck-Skalar-Kovarianzen und ihre Modellierung sind in Abb. 6.13 $\Pi_{\theta 3}^T$ und $\Pi_{\theta 1}^T$ sowie ihre Modellierung nach (6.7) und (6.9) dargestellt. Genauso wie bei den Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen, wird auch bei den Druck-Skalar-Kovarianzen basierend auf MIRONOV (2001) der subskalige Anteil \mathcal{P}_{si} zu Π_{si}^T addiert und nachfolgend als Π_{si}^T bezeichnet. Für die Konstante C_T wird in Abb. 6.13 nach MIRONOV (2001) ein Wert von 3.0 gewählt. Die Rotta-Parametrisierung des Basismodells und das TCL-Modell stimmen bei der vertikalen Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 3}^T$ über den größten Teil der Grenzschichten qualitativ mit den LES-Daten überein (Abb. 6.13a,b). Allerdings haben beide Parametrisierungen große Probleme im oberen Bereich der Wolkenschichten. Bei BOMEX

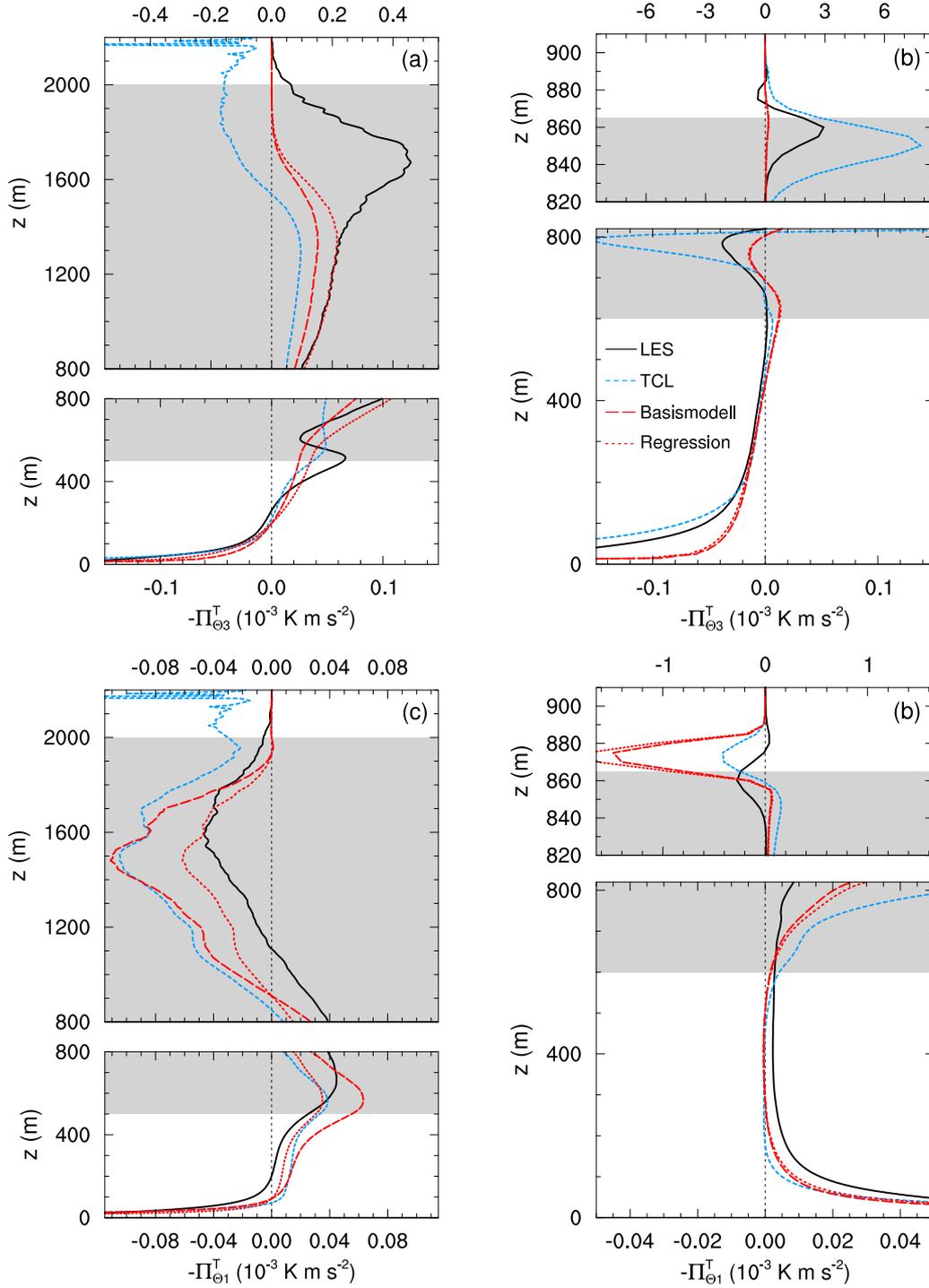


Abbildung 6.13: Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta_3}^T$ für BOMEX (a) und DYCOMS (b) sowie $\Pi_{\theta_1}^T$ für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Schwarze Linien zeigen $\Pi_{\theta_3}^T$ und $\Pi_{\theta_1}^T$ aus den LES-Daten, blaue Linien die auf CRAFT *et al.* (1996) basierende TCL-Parametrisierung (6.9) und rote Linien die auf ROTTA (1951) basierende Formulierung (6.7) des Basismodells, wobei die lang gestrichelten, roten Linien mit $C_T = 3.0$ bestimmt wurden und die kurz gestrichelten, roten Linien die über lineare Regression angepasste Formulierung darstellen. Die über Regression ermittelte Konstante C_T des Basismodells wurde in (a) zu $C_T = 4.26$, in (b) zu $C_T = 3.25$, in (c) zu $C_T = 1.66$ und in (d) zu $C_T = 3.50$ bestimmt (siehe auch Tab. 6.1). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

liefert das TCL-Modell dort sogar das falsche Vorzeichen. Bei DYCOMS überschätzt das TCL-Modell die LES-Daten erheblich, wohingegen die Formulierung des Basismodells viel zu kleine Werte liefert. Der funktionale Verlauf der horizontalen Kovarianz $\Pi_{\theta 1}^T$ kann von beiden Parametrisierungen in etwa wieder gegeben werden (Abb. 6.13c,d). Allerdings überschätzen sowohl das TCL-Modell als auch die Rotta-Parametrisierung des Basismodells innerhalb der Wolkenschichten die LES-Daten von BOMEX und DYCOMS. Die in Abb. 6.13a,c bei $z = 2200$ m sichtbaren Schwankungen des TCL-Modells gehen auf die Dissipationszeitkale zurück, deren Auswertung wie zuvor beschrieben in diesem Bereich Probleme bereitet. Die über lineare Regression angepassten Werte der Konstante C_T mit ihren Standardabweichungen sind Tab. 6.1 zu entnehmen. Für die vertikalen Druck-Skalar-Kovarianzen unterscheiden sich die optimalen Werte von C_T von einem zum anderen Skalar pro Fall kaum. Daher kann bei der Modellierung von $\Pi_{\theta 3}^T$ und $\Pi_{q 3}^T$ dieselbe Konstante verwendet werden. Die Werte der Konstanten der horizontalen Komponenten von Π_{si}^T weisen einen größeren Wertebereich und größere Standardabweichungen auf. Letztlich bedeutet dies, dass es keinen universellen Wert für C_T gibt, der für alle Komponenten und beide bewölkten Grenzschichten eine optimale Anpassung gewährleistet.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die auf ROTTA (1951) basierende Parametrisierung 6.6 des Basismodells für die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen eine relativ gute Übereinstimmung mit den LES-Daten über den größten Teil der bewölkten Grenzschichten liefert und das komplexere TCL-Modell 6.8 keine Verbesserung gegenüber dem Basismodell bringt. Die Rotta-Parametrisierung des Basismodells der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen kann also auch für bewölkte Grenzschichten eingesetzt werden. Bei den Druck-Skalar-Kovarianzen kommt es bei Verwendung der Rotta-Parametrisierung 6.7 des Basismodells am Oberrand der bewölkten Grenzschichten in Abhängigkeit von der Komponente zu erheblicher Über- bzw. Unterschätzung der LES-Daten. Auch das TCL-Modell 6.9 kann den Verlauf der LES-Daten in diesen Bereichen nicht besser wiedergeben. Unterhalb dieser Bereiche können das Basismodell und das TCL-Modell den funktionalen Verlauf von Π_{si}^T ähnlich gut wiedergeben. Um eine größere Übereinstimmung im oberen Bereich der Wolkenschichten zu erzielen, sollten die Modelle für Π_{si}^T weiterentwickelt werden.

6.5.2 Anteil durch Scherung

Um den Scherungsanteil Π_{ij}^S im Basismodell zu berücksichtigen, wird die IP-Parametrisierung (engl. *Isotropization of Production*) verwendet, wobei die Bezeichnung auf NAOT *et al.* (1970) zurückgeht. Die IP-Parametrisierung ist linear in den Momenten zweiter Ordnung und basiert auf der Idee, dass Π_{ij}^S die durch mittlere Scherung induzierte Anisotropie umverteilt. Die Umverteilung geschieht dabei von den Komponenten, bei denen die Produktion durch Scherung \mathcal{G}_{ij} groß ist, zu den übrigen Komponenten (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 68). Also wird analog zu ROTTA (1951) angenommen, dass der prinzipielle Einfluss des Scherungsanteils darin besteht, die durch Scherungsproduktion \mathcal{G}_{ij} in den Bilanzen der Impulsflüsse erzeugte Anisotropie zu reduzieren. Die mathematische Formulierung des Modells lautet

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ij}^S &= C_S^u \left(\mathcal{G}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{G}_{kk} \right) \\
 &= C_S^u \left[\left(\langle \overline{u'_j u'_k} \rangle + \langle \tau_{jk} \rangle \right) \frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_k} + \left(\langle \overline{u'_i u'_k} \rangle + \langle \tau_{ik} \rangle \right) \frac{\partial \langle \overline{u_j} \rangle}{\partial x_k} \right] \\
 &\quad - C_S^u \frac{2}{3} \delta_{ij} \left[\left(\langle \overline{u'_k u'_l} \rangle + \langle \tau_{kl} \rangle \right) \frac{\partial \langle \overline{u_k} \rangle}{\partial x_l} \right].
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

Für die Konstante C_S^u wird häufig der Wert 0.6 verwendet (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 68f).

Die IP-Parametrisierung des Basismodells für den Scherungsanteil Π_{si}^S der Druck-Skalar-Kovarianzen ergibt sich in analoger Weise zu

$$\Pi_{si}^S = -C_S \mathcal{G}_{si}^u = -C_S (\langle \overline{u_k'' \overline{s}''} \rangle + \langle \tau_{sk} \rangle) \frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_k}. \quad (6.12)$$

Die Konstante C_S liegt in einem Wertebereich von $0.4 \leq C_S \leq 0.55$. Dabei sei hier darauf aufmerksam gemacht, dass nur der Term \mathcal{G}_{si}^u , der proportional zum Gradienten der mittleren Geschwindigkeit ist, verwendet wird. Der Anteil vom Gradienten des mittleren Skalars \mathcal{G}_{si}^s fließt nicht in die IP-Parametrisierung ein, da dieser nicht durch Druckfluktuationen beeinflusst wird (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 68f).

Aus (6.11) und (6.12) wird deutlich, dass die IP-Parametrisierung proportional zum (anisotropen) Teil der jeweiligen Scherungsproduktion in den Bilanzgleichungen 3.12, 3.17 und 3.18 der Impuls- und Skalarflüsse ist. Da die Proportionalitätskonstanten C_S^u und C_S positiv und kleiner als Eins sind, wird bei der Verwendung der IP-Parametrisierung im Turbulenzmodell ein Teil der Scherungsproduktion, welcher Anisotropie in der Strömung verursacht, direkt kompensiert.

ZEMAN (1981) schlägt basierend auf LAUNDER *et al.* (1975) eine weitere lineare Formulierung für Π_{ij}^S und Π_{si}^S vor, um die atmosphärische Grenzschicht zu simulieren:

$$\Pi_{ij}^S = \left[\frac{4}{5} S_{ij} + C_{S1}^u \left(a_{ik} S_{jk} + a_{jk} S_{ik} - \frac{2}{3} \delta_{ij} a_{kl} S_{kl} \right) + C_{S2}^u (a_{ik} W_{jk} + a_{jk} W_{ik}) \right] E \quad (6.13)$$

und

$$\Pi_{si}^S = -[C_{S1} S_{ij} + C_{S2} W_{ij}] (\langle \overline{u_j'' \overline{s}''} \rangle + \langle \tau_{sj} \rangle) \quad (6.14)$$

mit $C_{S1}^u = 12/7$, $C_{S2}^u = 0$, $C_{S1} = 3/5$ und $C_{S2} = 1$. In (6.13) und (6.14) geht die Zerlegung des mittleren Gradiententensors $\partial \langle \overline{u_i} \rangle / \partial x_j$ in einen symmetrischen Deformationstensor S_{ij} und einen antisymmetrischen Rotationstensor W_{ij} ein, die

$$\frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_j} = \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \overline{u_j} \rangle}{\partial x_i} \right)}_{S_{ij}} + \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle \overline{u_i} \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial \langle \overline{u_j} \rangle}{\partial x_i} \right)}_{W_{ij}} \quad (6.15)$$

lautet. Darüber wird der Einfluss der Rotation, der sich in den Momenten zweiter Ordnung zum einen im Coriolisterm und zum anderen in der Druckfluktuation \overline{p}_S'' aufgrund von Scherung äußert (RISTORCELLI *et al.*, 1995), explizit berücksichtigt.

Zemans Formulierung (6.13) geht in die IP-Parametrisierung (6.11) über, wenn für $C_{S1}^u = 1$, $C_{S2}^u = -1$ gewählt und (6.13) mit C_S^u multipliziert wird. Ähnlich verhält es sich für die Druck-Skalar-Kovarianzen. Wird $C_{S1} = C_{S2} = 1$ gewählt und (6.14) mit C_S multipliziert, geht Zemans Parametrisierung (6.14) in die IP-Parametrisierung (6.12) über. Dies bedeutet also, dass sich beide linearen Formulierungen in der Verwendung einer unterschiedlichen Anzahl von Konstanten unterscheiden. Für die IP-Parametrisierung wird eine Konstante verwendet, wohingegen bei ZEMAN (1981) zwei Konstanten eingesetzt werden. Dadurch wird bei ZEMAN (1981) der Einfluss von Rotation durch eine unterschiedliche Gewichtung von Deformations- und Rotationsanteil explizit mit berücksichtigt.

Im Gegensatz zum turbulenten Anteil (Abschnitt 6.5.1) werden für den Scherungsanteil keine nicht-linearen Modelle mit den LES-Daten verglichen, da die nicht-linearen Ansätze für Π_{ij}^S und Π_{si}^S häufig sehr komplex sind (siehe z.B. RISTORCELLI *et al.*, 1995;

CRAFT *et al.*, 1996) und daher für die Anwendung in der Wettervorhersage gegenwärtig zu aufwendig sind.

Abb. 6.14 zeigt exemplarisch drei Komponenten des Scherungsanteils Π_{ij}^S der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen sowie die Parametrisierungen (6.11) und (6.13). Die IP-Parametrisierung des Basismodells wird mit $C_S^u = 0.6$ abgebildet und zusätzlich dazu die über lineare Regression angepasste Kurve des Basismodells gezeigt. Die Diagonalkomponente Π_{33}^S kann bei BOMEX und DYCOMS in der Nähe der Oberfläche nur von Zemans Formulierung qualitativ wiedergegeben werden (Abb. 6.14a,b). Beim Basismodell erhält der modellierte Scherungsanteil ein falsches Vorzeichen. Folglich wird mit der IP-Parametrisierung fälschlicherweise modelliert, dass die Druck-Kovarianz in Oberflächennähe vertikale Varianz produziert statt sie zu vernichten. Am Oberrand der Mischungsschichten ($z \approx 500$ m für BOMEX und $z \approx 850$ m für DYCOMS) liefert nun Zemans Parametrisierung ein falsches und das Basismodell ein korrektes Vorzeichen. Da der Scherungsanteil Π_{33}^S im Vergleich zu den übrigen Anteilen nur in Oberflächennähe signifikant ist (siehe auch Abb. 6.5c,d), ist dieses Fehlverhalten am Oberrand der Mischungsschichten tolerabel aber in Oberflächennähe nicht. Daher sollte für Π_{33}^S Zemans Formulierung der IP-Parametrisierung vorgezogen werden. Abb. 6.14a verdeutlicht noch einen weiteren Aspekt bezüglich der optimalen Konstantenbestimmung mit linearer Regression. In diesem Fall liefert die angepasste Parametrisierung vor allem bei $z \approx 500$ m eine schlechtere Anpassung als das Basismodell. Hieran zeigt sich, dass die optimale Konstante nicht für alle Höhenbereiche die optimale Anpassung liefern kann und somit zur besseren Übereinstimmung mit Π_{33}^S eine Funktion statt einer Konstanten angepasst werden sollte.

Für die horizontale Komponente Π_{12}^S (Abb. 6.14c,d), deren Anteil bei beiden untersuchten Fällen über die gesamte Höhe der Grenzschichten ebenso bedeutend wie der turbulente Anteil und der Auftriebsanteil ist, liefern beide lineare Modelle eine sehr gute Übereinstimmung mit den LES-Daten. Die über lineare Regression ermittelten optimalen Konstanten liegen mit 0.77 ± 0.78 bei BOMEX und 0.80 ± 0.71 bei DYCOMS nicht weit entfernt vom häufig verwendeten Wert von 0.6. Allerdings zeigt die Standardabweichung, die in derselben Größenordnung wie der Mittelwert ist, dass die Streuung um den Mittelwert relativ hoch ist. Auch Π_{13}^S kann abgesehen von den oberflächennahen Bereichen und dem Oberrand der Grenzschichten von der IP-Parametrisierung des Basismodells und Zemans Formulierung ähnlich gut wiedergegeben werden, wobei Zemans Formulierung (6.13) bei BOMEX und DYCOMS die LES-Daten gegenüber der IP-Parametrisierung überschätzt (Abb. 6.14e,f). In beiden Fällen liefert ein Wert für C_S^u von kleiner 0.6 eine optimale Anpassung des Basismodells an die LES-Daten. Die mit linearer Regression ermittelten, optimalen Werte für die Konstante C_S^u aller Komponenten von Π_{ij}^S sowie die zugehörigen Standardabweichungen sind in Tab. 6.2 zusammengefasst. Für die Nebendiagonalkomponenten liegen die Werte alle in der Nähe von 0.6. Bei den Diagonalkomponenten, für welche die IP-Parametrisierung weniger gut geeignet ist, sind die angepassten Konstanten in fast allen Fällen größer als Eins. Hier gilt es zu beachten, dass die Scherungsanteile ihre Maxima in der Nähe der Oberfläche aufweisen, dieser Höhenbereich aber bei der Anpassung unberücksichtigt bleibt (siehe Abschnitt 6.5), sodass die angepassten Konstanten weniger aussagekräftig sind.

Π_{01}^S und die Parametrisierungen (6.12) und (6.14) sind in Abb. 6.15 dargestellt. Der funktionale Verlauf von Π_{01}^S kann von beiden linearen Modellen gut wiedergegeben werden (Abb. 6.15a,b). Bei DYCOMS überschätzt Zemans Formulierung die LES-Daten insbesondere am Oberrand der Grenzschicht, welches mit der IP-Parametrisierung und einem optimalen Wert für C_S von 0.29 nicht der Fall ist. Tab. 6.2 enthält auch die über lineare Regression ermittelten optimalen Werte von C_S der übrigen Komponenten, die alle kleiner

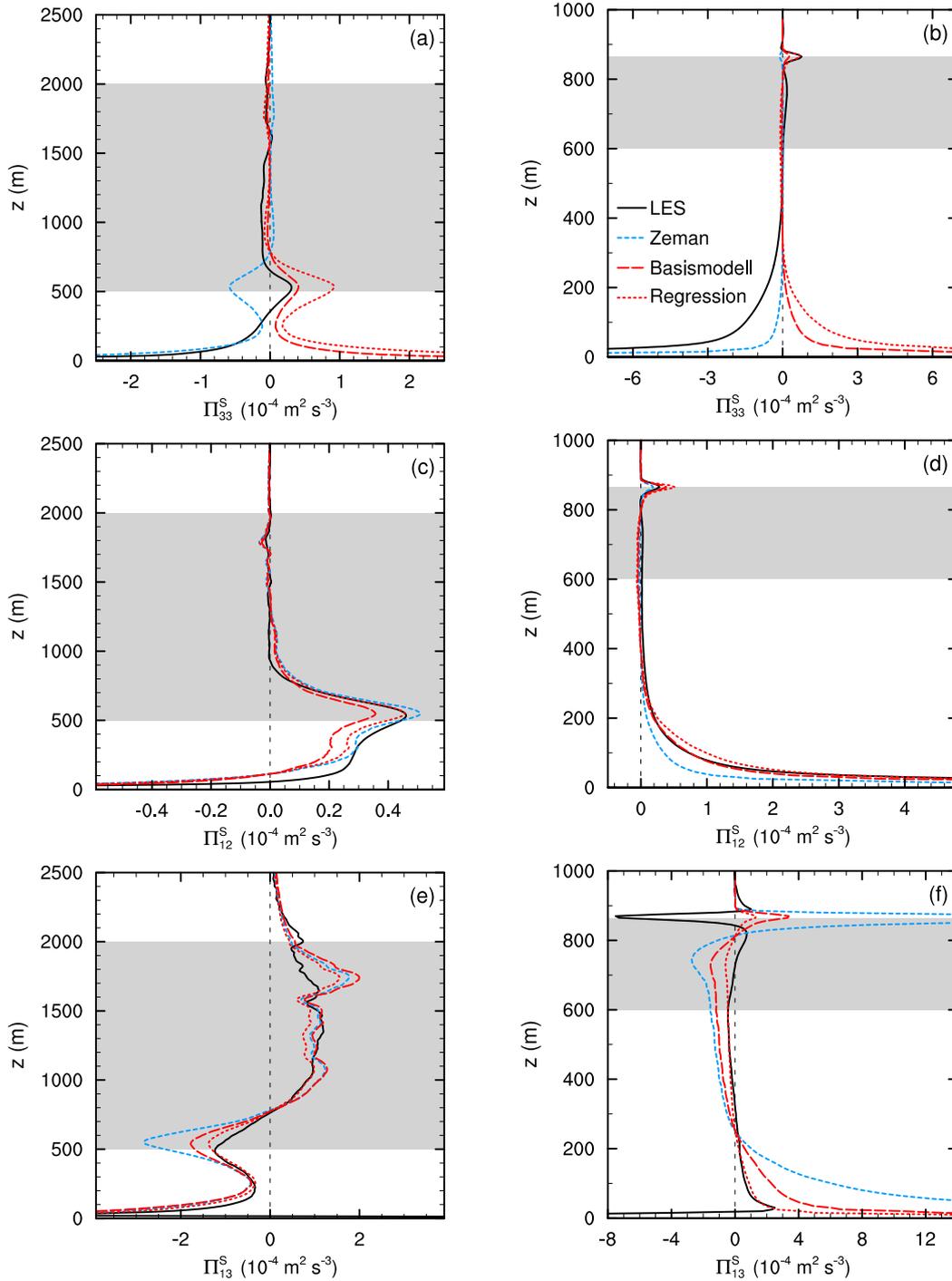


Abbildung 6.14: Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{33}^S für BOMEX (a) und DYCOMS (b), Π_{12}^S für BOMEX (c) und DYCOMS (d) sowie Π_{13}^S für BOMEX (e) und DYCOMS (f). Schwarze Linien zeigen Π_{33}^S , Π_{12}^S und Π_{13}^S aus den LES-Daten, blaue Linien die auf ZEMAN (1981) basierende Parametrisierung (6.13) und rote Linien die IP-Parametrisierung (6.11) des Basismodells, wobei die lang gestrichelten, roten Linien mit $C_S^u = 0.6$ bestimmt wurden und die kurz gestrichelten, roten Linien die über lineare Regression angepasste Formulierung des Basismodells darstellen. Die über Regression ermittelte Konstante C_S^u wurde in (a) zu $C_S^u = 1.36$, in (b) zu $C_S^u = 1.62$, in (c) zu $C_S^u = 0.77$ in (d) zu $C_S^u = 0.80$, in (e) zu $C_S^u = 0.47$ und in (f) zu $C_S^u = 0.23$ bestimmt (siehe auch Tab. 6.2). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

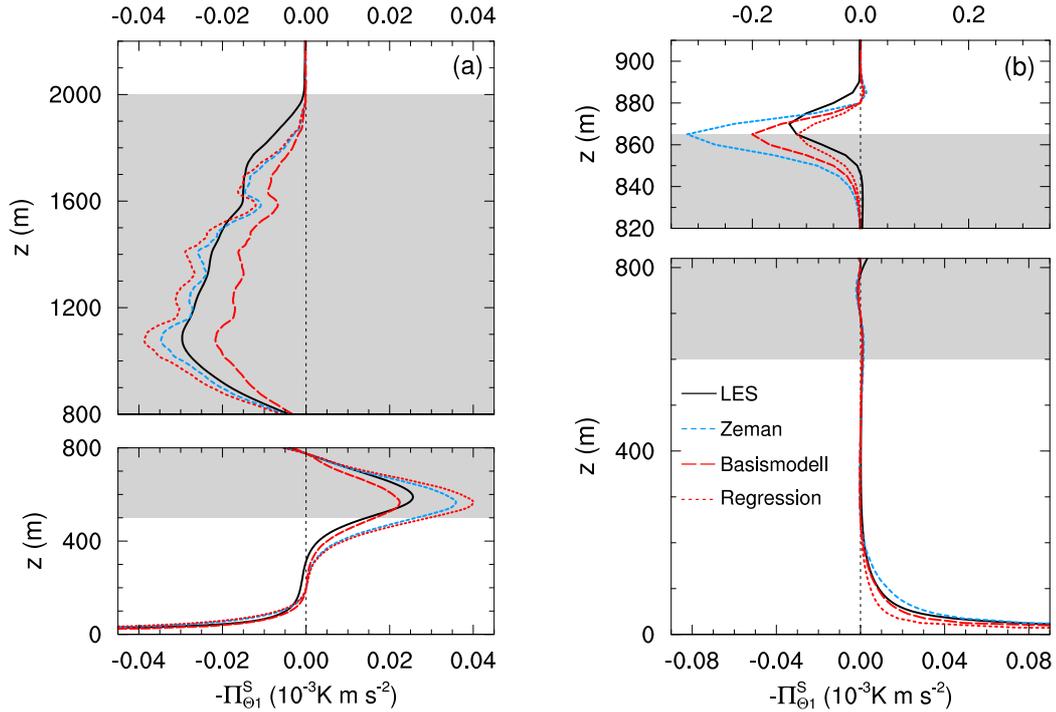


Abbildung 6.15: Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta 1}^S$ für BOMEX (a) und DYCOMS (b). Schwarze Linien zeigen $\Pi_{\theta 1}^S$ aus den LES-Daten, blaue Linien die auf ZEMAN (1981) basierende Parametrisierung (6.14) und rote Linien die IP-Parametrisierung (6.12) des Basismodells, wobei die lang gestrichelten, roten Linien mit $C_S = 0.5$ bestimmt wurden und die kurz gestrichelten, roten Linien die über lineare Regression angepasste Formulierung darstellen. Die über Regression ermittelte Konstante C_S des Basismodells wurde in (a) zu $C_S = 0.89$ und in (b) zu $C_S = 0.29$ bestimmt (siehe auch Tab. 6.2). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

als Eins sind. Es zeigt sich, dass nicht alle Komponenten dieselbe optimale Konstante aufweisen. Der Wertebereich der auftretenden Konstanten ist größer als der in der Literatur zu $0.4 \leq C_S \leq 0.55$ angegebene Bereich. Daher sollte bei der Verwendung des Basismodells für den Scherungsanteil bei der Turbulenzmodellierung ein größerer Bereich an möglichen empirischen Werten in berücksichtigt werden.

Für die vertikale Komponente $\Pi_{\theta 3}^S$ liefert die IP-Parametrisierung (6.12) aufgrund von horizontaler Homogenität Null. Zemans Parametrisierung (6.14) erzeugt lediglich dieselbe Größenordnung wie die LES-Daten, ohne den funktionalen Verlauf wiedergeben zu können (nicht gezeigt). Da der Scherungsanteil bei Π_{s3} gegenüber den anderen Komponenten von untergeordneter Bedeutung ist (siehe Abb. 6.9), ist auch seine Modellierung für die gesamte Druck-Kovarianz nicht sonderlich entscheidend, sodass sowohl die IP-Parametrisierung wie auch Zemans Parametrisierung eingesetzt werden können.

Insgesamt betrachtet unterscheiden sich die zwei untersuchten linearen Parametrisierungen kaum voneinander. Sie können beide die Nebendiagonalkomponenten der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen und die horizontalen Komponenten der Druck-Skalar-Kovarianzen in guter funktionaler Übereinstimmung mit den LES-Daten reproduzieren. Die Diagonalkomponenten von Π_{ij}^S bereiten den Modellen teilweise größere Probleme. Alles in allem sind die linearen Modelle jedoch in der Lage, den Scherungsanteil an den Druck-

	Π_{11}^S	Π_{22}^S	Π_{33}^S	Π_{12}^S	Π_{13}^S	Π_{23}^S	Lit.
C_S^u (B)	0.67±0.57	1.30±1.20	1.36±1.17	0.77±0.78	0.47±0.14	0.66±0.69	0.6
C_S^u (D)	1.12±0.96	1.47±1.31	1.62±1.29	0.80±0.71	0.23±0.30	0.44±0.61	

	$\Pi_{\theta 1}^S$	$\Pi_{\theta 2}^S$	$\Pi_{\theta 3}^S$	$\Pi_{q 1}^S$	$\Pi_{q 2}^S$	$\Pi_{q 3}^S$	Lit.
C_S (B)	0.89±0.96	0.78±0.93	-	0.91±0.72	0.77±0.94	-	0.4–0.55
C_S (D)	0.29±0.98	0.70±1.28	-	0.46±0.19	0.45±0.96	-	

Tabelle 6.2: Werte der an die LES-Daten angepassten Modellierungskonstanten C_S^u und C_S mit ihren Standardabweichungen für BOMEX (B) und DYCOMS (D). Es handelt sich um die Konstanten der IP-Parametrisierungen 6.11 und 6.12 des Basismodells. Zur Anpassung wurde lineare Regression verwendet. Für die vertikalen Druck-Skalar-Kovarianzen ist keine Anpassung möglich, da (6.11) bei horizontaler Homogenität in diesen Komponenten Null ergibt. Die Literaturwerte (Lit.) entstammen HANJALIĆ und LAUNDER (2011, S. 68).

Kovarianzen für bewölkte Grenzschichten qualitativ wiederzugeben, sodass sie auch bei Grenzschichten mit flachen Wolken bei der Turbulenzmodellierung eingesetzt werden können.

6.5.3 Anteil durch Auftrieb

Für den Auftriebsanteil lässt sich genau wie für den Scherungsanteil eine lineare IP-Parametrisierung aufstellen, die Teil des Basismodells ist und nach HANJALIĆ und LAUNDER (2011, S. 119f)

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ij}^B &= -C_B^u \left(\mathcal{B}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{B}_{kk} \right) \\
 &= -C_B^u \left[\frac{g}{\theta_0} \delta_{i3} \left(\langle \bar{u}'_j \bar{\theta}'_v \rangle + \langle \tau_{vj} \rangle \right) + \frac{g}{\theta_0} \delta_{j3} \left(\langle \bar{u}'_i \bar{\theta}'_v \rangle + \langle \tau_{vi} \rangle \right) \right] \\
 &\quad + C_B^u \frac{2}{3} \delta_{ij} \left[\frac{g}{\theta_0} \delta_{k3} \left(\langle \bar{u}'_k \bar{\theta}'_v \rangle + \langle \tau_{vk} \rangle \right) \right]
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

lautet. Empirisch bestimmte Werte für die Konstante C_B^u liegen im Bereich $0.5 \leq C_B^u \leq 0.6$. Für den Fall, dass die Turbulenz isotrop ist, kann (6.16) auch auf analytischem Weg hergeleitet werden, wobei dann $C_B^u = 0.3$ gilt (z.B. ZEMAN, 1981).

Analog folgt für den Auftriebsanteil Π_{si}^B der Druck-Skalar-Kovarianz die IP-Parametrisierung

$$\Pi_{si}^B = C_B \mathcal{B}_{si} = C_B \frac{g}{\theta_0} \delta_{i3} \left(\langle \bar{s}' \bar{\theta}'_v \rangle + \langle \tau_{vs} \rangle \right). \tag{6.17}$$

Bei isotroper Turbulenz gilt $C_B = 1/3$ (z.B. LUMLEY, 1978; ZEMAN, 1981). Allerdings zeigen MÖENG und WYNGAARD (1986), dass ein empirischer Wert von $C_B = 0.5$ eine bessere Übereinstimmung mit LES-Daten von trockenen konvektiven Grenzschichten liefert. Die IP-Parametrisierungen (6.16) und (6.17) sind proportional zur Auftriebsproduktion der

Impuls- und Skalarflüsse (Gln. 3.12, 3.18 u. 3.17). Die Konstanten sind kleiner als Eins, sodass durch Verwendung dieser Parametrisierungen in Bilanzgleichungen der Flüsse direkt ein Teil der durch Auftrieb erzeugten Anisotropie der Strömung kompensiert wird.

Das nicht-lineare TCL-Modell nach CRAFT *et al.* (1996) lautet für den Auftriebsanteil der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ij}^B = & - \left(\frac{3}{10} + \frac{3A_2}{80} \right) \left(\mathcal{B}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{B}_{kk} \right) + \frac{1}{6} a_{ij} \mathcal{B}_{kk} \\
 & + \frac{2}{15} \frac{g}{\theta_0} \left(\langle \bar{u}_m'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vm} \rangle \right) (\delta_{i3} a_{mj} + \delta_{j3} a_{mi}) \\
 & - \frac{1}{3} \frac{g}{\theta_0} \delta_{k3} \left[a_{ik} \left(\langle \bar{u}_j'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vj} \rangle \right) + a_{jk} \left(\langle \bar{u}_i'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vi} \rangle \right) \right] \\
 & + \frac{1}{10} \frac{g}{\theta_0} \delta_{ij} \delta_{k3} a_{mk} \left(\langle \bar{u}_m'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vm} \rangle \right) \\
 & + \frac{1}{4} \frac{g}{\theta_0} \delta_{k3} a_{ij} a_{mk} \left(\langle \bar{u}_m'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vm} \rangle \right) \\
 & + \frac{1}{8} \frac{g}{\theta_0} \delta_{k3} [a_{ki} a_{mj} + a_{kj} a_{mi}] \left(\langle \bar{u}_m'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vm} \rangle \right) \\
 & - \frac{1}{8} \frac{g}{\theta_0} \delta_{k3} a_{mk} \left[a_{mj} \left(\langle \bar{u}_i'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vi} \rangle \right) + a_{mi} \left(\langle \bar{u}_j'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vj} \rangle \right) \right] \\
 & - \frac{3}{40} \frac{g}{\theta_0} \left[a_{mk} \left(\langle \bar{u}_k'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vk} \rangle \right) (\delta_{i3} a_{mj} + \delta_{j3} a_{mi}) \right] \\
 & + \frac{3}{40} \frac{g}{\theta_0} \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{k3} a_{mk} a_{mn} \left(\langle \bar{u}_n'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vn} \rangle \right),
 \end{aligned} \tag{6.18}$$

wobei eine Formulierung nach HANJALIĆ und LAUNDER (2011, S. 123) verwendet wird. $A_2 = a_{ij} a_{ji}$ ist eine Invariante des Tensors a_{ij} , die auch in (6.8) einfließt. Bei Isotropie gilt $a_{ij} = 0$ in allen Komponenten. In diesem Fall reduziert sich (6.18) zur IP-Parametrisierung 6.16 mit einer Modellierungskonstanten $C_B^u = 0.3$. Folglich ergeben beide Modelle für den Spezialfall isotroper Turbulenz dieselbe Formulierung.

Die Parametrisierung des Auftriebsanteils Π_{si}^B der Druck-Skalar-Kovarianz des TCL-Modells nach CRAFT *et al.* (1996) lautet

$$\Pi_{si}^B = \left(\frac{1}{3} \delta_{ik} - a_{ik} \right) \frac{g}{\theta_0} \delta_{k3} \left(\langle \bar{s}'' \bar{\theta}_v'' \rangle + \langle \tau_{vs} \rangle \right). \tag{6.19}$$

Diese Formulierung unterscheidet sich von der IP-Parametrisierung (6.17) insofern, dass (6.19) einen nicht-konstanten Faktor $(\frac{1}{3} \delta_{ik} - a_{ik}) \delta_{k3}$ besitzt. Durch diesen Faktor liefert (6.19) auch für die horizontalen Komponenten ($i \neq 3$) einen Verlauf ungleich Null, welches die IP-Parametrisierung (6.17) nicht leisten kann.

In Abb. 6.16 werden die LES-Daten von drei Komponenten der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{ij}^B mit den Parametrisierungen (6.16) und (6.18) verglichen. Für die Modellierungskonstante der IP-Parametrisierung (6.16) werden $C_B^u = 0.5$ sowie die über lineare Regression ermittelten, optimalen Konstanten verwendet. In den Diagonalkomponenten Π_{11}^B und Π_{33}^B (Abb. 6.16a-d) weisen die lineare IP-Parametrisierung und das nicht-lineare TCL-Modell über weite Teile der bewölkten Grenzschichten einen ähnlichen Verlauf auf, der jedoch nur annähernd mit den LES-Daten übereinstimmt. Auffällig ist der nahezu lineare Verlauf der IP-Parametrisierung (6.16) unterhalb der Wolkenschichten. Dieser stellt sich aufgrund der direkten Proportionalität von (6.16) zur Auftriebsproduktion \mathcal{B}_{ij} ein. Da $\mathcal{B}_{11} = \mathcal{B}_{22} = 0$ gilt, also in den Bilanzen der horizontalen Varianzen keine Produktion

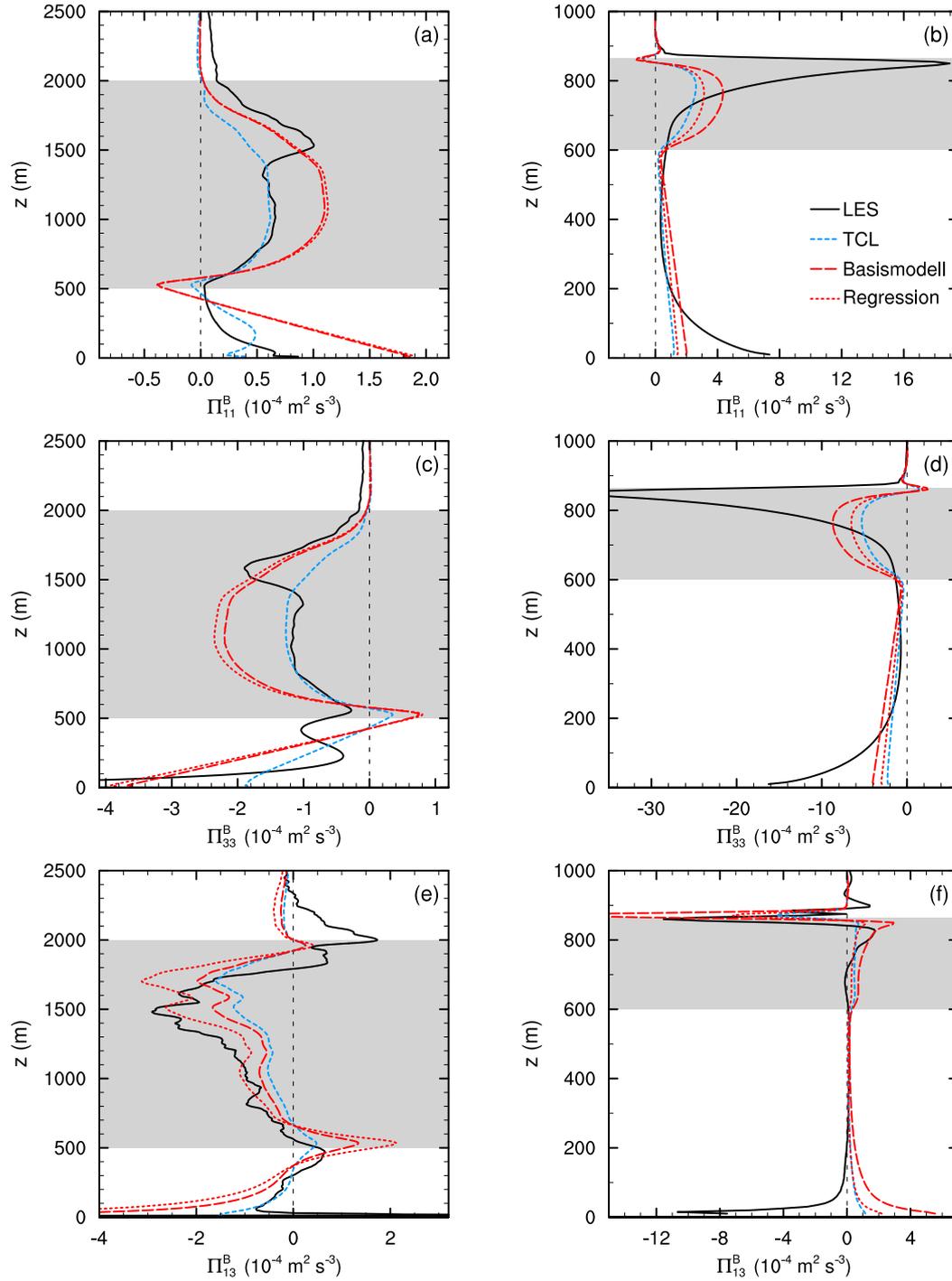


Abbildung 6.16: Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz Π_{11}^B für BOMEX (a) und DYCOMS (b), Π_{33}^B für BOMEX (c) und DYCOMS (d) sowie Π_{13}^B für BOMEX (e) und DYCOMS (f). Schwarze Linien zeigen Π_{11}^B , Π_{33}^B und Π_{13}^B aus den LES-Daten, blaue Linien die auf CRAFT *et al.* (1996) basierende Parametrisierung (6.18) und rote Linien der IP-Parametrisierung (6.16), wobei die lang gestrichelten, roten Linien mit $C_B^u = 0.5$ bestimmt wurden und die kurz gestrichelten, roten Linien die über lineare Regression angepasste Formulierung darstellen. Die über Regression ermittelte Konstante C_B^u des Basismodells wurde in (a) zu $C_B^u = 0.52$, in (b) zu $C_B^u = 0.36$, in (c) zu $C_B^u = 0.54$ in (d) zu $C_B^u = 0.38$, in (e) zu $C_B^u = 0.79$ und in (f) zu $C_B^u = 0.20$ bestimmt (siehe auch Tab. 6.3). Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

	Π_{11}^B	Π_{22}^B	Π_{33}^B	Π_{12}^B	Π_{13}^B	Π_{23}^B	Lit.
C_B^u (B)	0.52±0.57	0.49±0.59	0.54±0.53	-	0.79±0.60	0.77±0.83	0.5–0.6
C_B^u (D)	0.36±0.20	0.39±0.20	0.38±0.20	-	0.20±0.15	0.38±0.30	

	$\Pi_{\theta 1}^B$	$\Pi_{\theta 2}^B$	$\Pi_{\theta 3}^B$	$\Pi_{q 1}^B$	$\Pi_{q 2}^B$	$\Pi_{q 3}^B$	Lit.
C_B (B)	-	-	0.48±0.08	-	-	0.51±0.13	0.5
C_B (D)	-	-	0.47±0.40	-	-	0.48±0.19	

Tabelle 6.3: Werte der an die LES-Daten angepassten Modellierungskonstanten C_B^u und C_B mit ihren Standardabweichungen für BOMEX (B) und DYCOMS (D). Es handelt sich um die Konstanten der IP-Parametrisierungen 6.16 und 6.17 des Basismodells. Zur Anpassung wurde lineare Regression verwendet. Für die horizontalen Druck-Skalar-Kovarianzen ist keine Anpassung möglich, da (6.17) in diesen Komponenten Null ergibt. Die Literaturwerte (Lit.) für C_B^u entstammen HANJALIĆ und LAUNDER (2011, S. 120) und die für C_B sind MOENG und WYNGAARD (1986) entnommen.

durch Auftrieb möglich ist (siehe auch Abschnitt 5.3), geht in (6.16) nur die Komponente \mathcal{B}_{33} ein. \mathcal{B}_{33} ist die wiederum proportional zum Auftriebsfluss, welcher unterhalb der Wolkenschichten linear mit der Höhe abnimmt (siehe auch 4.3d und 4.7h). Allerdings weisen Π_{11}^B und Π_{33}^B dort keinen linearen Verlauf auf, sodass diese Parametrisierung unterhalb der Wolkenschichten weniger geeignet ist. Auch innerhalb der Wolkenschichten kann der funktionale Verlauf der LES-Daten nicht reproduziert werden. Alles in allem scheint die IP-Parametrisierung für die Diagonalkomponenten zu vereinfachend zu sein. Auch das komplexere TCL-Modell liefert keine gute Übereinstimmung.

Im Vergleich zu den Diagonalkomponenten stimmen die Parametrisierungen für die Nebendiagonalkomponenten wie Π_{13}^B (Abb. 6.16e,f) deutlich besser mit den LES-Daten überein. Außer in Oberflächennähe wird der Verlauf der LES-Daten von beiden untersuchten Modellen in weitestgehend funktionaler Übereinstimmung reproduziert. Da der Auftriebanteil an Π_{13} im Vergleich zu den Anteilen aufgrund von Scherung und turbulenten Interaktionen in der Nähe der Oberfläche gering ist (siehe Abb. 6.6), ist auch das Versagen der Parametrisierungen in diesem Bereich nicht so weitreichend für die Modellierung der gesamten Druck-Geschwindigkeits-Kovarianz. Die in Tab. 6.3 zusammengefassten Werte der optimalen Konstanten für die IP-Parametrisierung sind alle kleiner als Eins, wie es die IP-Parametrisierung vorsieht. Der Bereich der auftretenden Werte ist größer als der in der Literatur mit $0.5 \leq C_B^u \leq 0.6$ angegebene Bereich und weist hohe Standardabweichungen auf. Jedoch weisen die Werte jeweils für eine Simulation betrachtet und unterschieden in Diagonal- und Nebendiagonalkomponenten sehr ähnliche Werte auf, sodass keine Unterscheidung zwischen den einzelnen Diagonal- und Nebendiagonalkomponenten notwendig ist.

Abb. 6.17 enthält exemplarisch zwei Komponenten des Auftriebanteils der Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta i}^B$ sowie ihre Parametrisierung nach (6.17) und (6.19). Während das TCL-Modell bei BOMEX innerhalb der Kumulusschicht die LES-Daten von $\Pi_{\theta 3}^B$ deutlich unterschätzt und bei DYCOMS am Grenzschichtoberrand überschätzt, ist die IP-Parametrisierung für beide bewölkte Grenzschichten in der Lage, $\Pi_{\theta 3}^B$ sehr gut wiederzu-

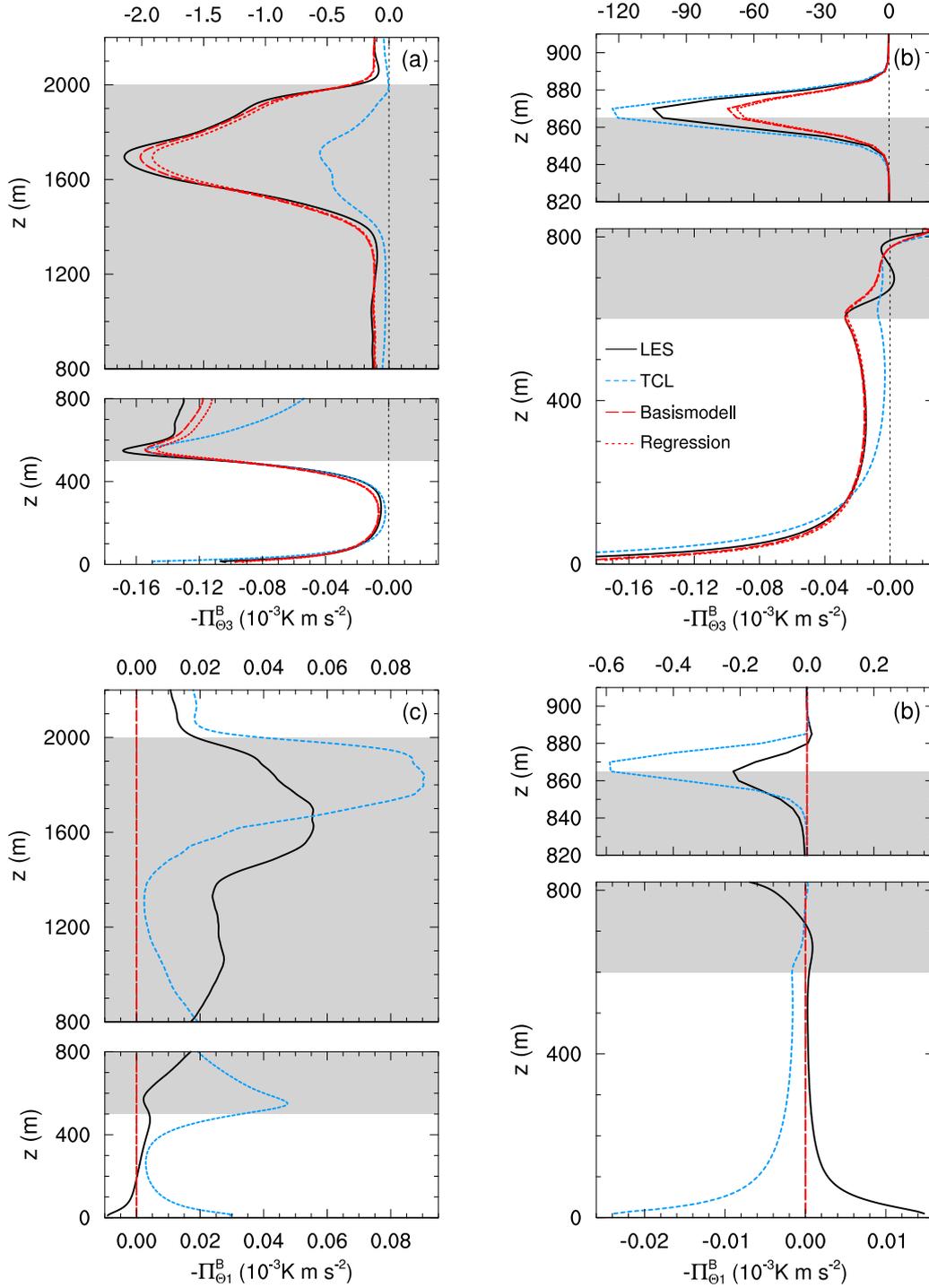


Abbildung 6.17: Druck-Temperatur-Kovarianz $\Pi_{\theta_3}^B$ für BOMEX (a) und DYCOMS (b) sowie $\Pi_{\theta_1}^B$ für BOMEX (c) und DYCOMS (d). Schwarze Linien zeigen $\Pi_{\theta_3}^B$ und $\Pi_{\theta_1}^B$ aus den LES-Daten, blaue Linien die auf CRAFT *et al.* (1996) basierende Parametrisierung (6.19) und rote Linien die IP-Parametrisierung (6.17) des Basismodells, wobei die lang gestrichelten, roten Linien mit $C_B = 0.5$ bestimmt wurden und die kurz gestrichelten, roten Linien die über lineare Regression angepasste Formulierung darstellen. Die über Regression ermittelte Konstante C_B des Basismodells wurde in (a) zu $C_B = 0.48$, in (b) zu $C_S = 0.47$ bestimmt (siehe auch Tab. 6.3). In (c) und (d) wurde keine Anpassung vorgenommen, weil (6.17) in diesen Komponenten Null liefert. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

geben (Abb. 6.17a,b). Lediglich die Maxima in den stabil geschichteten Bereichen werden von der IP-Parametrisierung unterschätzt. Es zeigt sich also, dass die einfachere IP-Parametrisierung dem komplexen, nicht-linearen TCL-Modell bei der Modellierung von $\Pi_{\theta_3}^B$ überlegen ist. Diese Beobachtung ist in Einklang mit MIRONOV (2001), der eben dieses Verhalten bei einer trockenen konvektiven Grenzschicht beobachtet. Die optimalen Werte der Konstante C_B des Basismodells liegen sowohl für $\Pi_{\theta_3}^B$ als auch für $\Pi_{q_3}^B$ bei ungefähr 0.5 und weisen abgesehen von einem Fall relativ kleine Standardabweichungen auf (siehe Tab. 6.3). Dies bestätigt MOENG und WYNGAARD (1986) sowie MIRONOV (2001), die 0.5 als Richtwert für C_B bei konvektiven Grenzschichten ermittelten. Da die IP-Parametrisierung 6.17 proportional zur Auftriebsproduktion \mathcal{B}_{θ_3} mit $C_B = 0.5$ ist, kompensiert der Auftriebsanteil $\Pi_{\theta_3}^B$ also ca. die Hälfte der Auftriebsproduktion in den skalaren Bilanzgleichungen. Die starke Verknüpfung der Auftriebsproduktion \mathcal{B}_{s_3} mit der gesamten vertikalen Druck-Kovarianz Π_{s_3} zeigt sich auch in den Bilanzen an der Spiegelbildlichkeit der zwei Terme zueinander (siehe Abb. 5.14) und erklärt, warum die IP-Parametrisierung gut funktioniert.

Als Beispiel für eine horizontale Komponente der Druck-Skalar-Kovarianzen ist in Abb. 6.17b,c $\Pi_{\theta_1}^B$ mit ihren Parametrisierungen dargestellt. Die IP-Parametrisierung 6.17 liefert für die horizontalen Komponenten Null, weil die horizontalen Flüsse nicht direkt durch Auftrieb produziert werden können ($\mathcal{B}_{s_1} = \mathcal{B}_{s_2} = 0$). Dies ist nicht im Einklang mit den in Abschnitt 6.4 erzielten Ergebnisse, da die horizontalen Komponenten von $\Pi_{s_i}^B$ über weite Teile der untersuchten Grenzschichten in derselben Größenordnung wie die Anteile aufgrund von Scherung und turbulenten Interaktionen sind (siehe Abb. 6.10) und demnach auch nicht vernachlässigt werden können. Für diese Komponenten ist die IP-Parametrisierung also zu stark vereinfachend und sollte nicht verwendet werden. Auch das TCL-Modell hat Schwierigkeiten, den Verlauf von $\Pi_{s_1}^B$ zu reproduzieren (Abb. 6.17c,d). Es kann zwar dieselbe Größenordnung wie die LES-Daten liefern, aber den funktionalen Verlauf kaum abbilden.

An dieser Stelle soll festgehalten werden, dass die untersuchten Parametrisierungen für die Diagonalkomponenten von Π_{ij}^B verbesserungswürdig sind, da sie den funktionalen Verlauf nur unzureichend wiedergeben können. Die Nebendiagonalkomponenten können deutlich besser von Basismodell und TCL-Modell abgebildet werden, wobei sich kaum Unterschiede zwischen dem linearen IP- und dem nicht-linearen TCL-Modell ergeben, sodass die Verwendung des einfacheren, linearen Basismodells für die Anwendung in der Wettervorhersage empfohlen wird. Bei den Druck-Skalar-Kovarianzen sollte das Basismodell nur für die vertikale Komponente verwendet werden. Da Auftrieb auch bei den horizontalen Komponenten von Bedeutung ist, aber über das lineare Basismodell nicht erfasst und auch vom TCL-Modell nur unzureichend wiedergegeben werden kann, bietet sich hier ein Ansatzpunkt zur Verbesserung der Modellierung an.

6.5.4 Vergleich zweier Aufspaltungen

Wie in Abschnitt 6.3 gezeigt, ist die Aufspaltung der ursprünglich in die Impulsflussbilanzgleichungen einfließenden Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen $\tilde{\phi}_{ij}$ keineswegs eindeutig. Die diskutierten Aufspaltungen bestehen beide jeweils aus einem Transportterm \mathcal{T}_{ij}^P bzw. \mathcal{I}_{ij} und einem redistributiven Term Π_{ij} bzw. ϕ_{ij} (siehe Gln. 6.2 u. 6.3). Inwieweit die beiden Zerlegungen sich unterscheiden, wird in Abschnitt 6.3 aufgezeigt. Da Π_{ij} und ϕ_{ij} beide dieselben Tensoreigenschaften aufweisen, werden sie in der Regel mit denselben Modellen abgebildet (SPEZIALE, 1984). Nachdem in den vorherigen Abschnitten die Parametrisierungen mit den aus der traditionellen Aufspaltung folgenden Anteilen an

der Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianz Π_{ij} verglichen worden sind, folgt nun anhand exemplarisch ausgewählter Beispiele ein Vergleich der Parametrisierungen mit den deviatorischen Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen ϕ_{ij} . Außerdem werden Werte der Modellierungskonstanten C_T^u , C_S^u und C_B^u des Basismodells durch Anpassung an ϕ_{ij} ermittelt und diskutiert. Die zuvor aufgezeigten Parametrisierungen werden in derselben Form auch für die einzelnen Anteile von $-\phi_{ij}$ angenommen. Dabei ergibt sich das negative Vorzeichen aus der Impulsflussbilanz, in die ϕ_{ij} mit negativem Vorzeichen eingeht.

In Abb. 6.18 werden exemplarisch drei verschiedene Anteile und Komponenten der deviatorischen Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen, welche $-\phi_{33}^T$, $-\phi_{13}^S$ und $-\phi_{11}^B$ umfassen, mit den jeweils für sie gültigen und in den vorherigen Abschnitten 6.5.1-6.5.3 beschriebenen Parametrisierungen aufgezeigt. Zu Vergleichszwecken sind auch die Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianzen Π_{33}^T , Π_{13}^S und Π_{11}^B eingetragen.

Der funktionale Verlauf von $-\phi_{33}^T$ kann sowohl vom TCL-Modell 6.8 als auch von der Rotta-Formulierung 6.6 des Basismodells prinzipiell wiedergegeben werden (Abb. 6.18a,b). Im Vergleich zu Π_{33}^T zeigt sich bei BOMEX, dass die Parametrisierungen in der trockene Grenzschicht ($z < 500$ m) besser mit Π_{33}^T als mit $-\phi_{33}^T$ übereinstimmen. Bei DYCOMS ist genau das Gegenteil der Fall. Hier können die untersuchten Parametrisierungen über die gesamte Grenzschicht den deviatorischen Term $-\phi_{33}^T$ besser abbilden.

Der Scherungsanteil $-\phi_{13}^S$ kann von der IP-Parametrisierung 6.11 des Basismodells in sehr guter Übereinstimmung mit den LES-Daten wiedergegeben werden (Abb. 6.18c,d). Die auf ZEMAN (1981) basierende Parametrisierung 6.13 überschätzt die LES-Daten in einigen Bereichen, welches besonders bei DYCOMS auffällig ist. Der deviatorische Term $-\phi_{13}^S$ wird von den Parametrisierungen vor allem in Oberflächennähe und am Oberrand der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht deutlich besser als der traditionelle Term Π_{13}^S reproduziert.

Bei BOMEX kann der Verlauf des Auftriebsanteils $-\phi_{11}^B$ für $z < 1000$ m vom TCL-Modell 6.18 grundsätzlich reproduziert werden, wobei die Extrema in diesem Bereich allerdings unterschätzt werden (Abb. 6.18e). Die IP-Parametrisierung 6.16 gibt nur den groben Verlauf von $-\phi_{11}^B$ wieder. Bei DYCOMS zeigen IP-Parametrisierung und TCL-Modell keine großen Unterschiede zueinander auf und bilden den Verlauf von $-\phi_{11}^B$ qualitativ ab (Abb. 6.18f). Die untersuchten Parametrisierungen können sowohl bei BOMEX als auch bei DYCOMS den deviatorischen Term $-\phi_{11}^B$ besser als den traditionellen Term Π_{11}^B wiedergeben.

Tab. 6.4 enthält die Werte der Modellierungskonstanten C_T^u , C_S^u sowie C_B^u des Basismodells mit ihren Standardabweichungen, die sich durch Anpassung mit linearer Regression an die jeweiligen Anteile des deviatorischen Terms $-\phi_{ij}$ ergeben. Die Werte für C_T^u der einzelnen Komponenten liegen alle bis auf eine Ausnahme in dem aus der Literatur bekannten Wertebereich, wobei die Standardabweichungen größtenteils in derselben Größenordnung wie die Werte der Konstanten liegen. Bei C_S^u sind die Werte teilweise mehr als doppelt so groß als der Literaturwert 0.6. Die Werte für C_B^u schwanken leicht um den für sie typischen Bereich von 0.5–0.6. Damit sind die Wertebereiche der Konstanten vergleichbar zu denen, die durch Anpassung an den traditionellen Term Π_{ij} erhalten und in Tab. 6.1, 6.2 und 6.3 aufgelistet werden.

Der soeben durchgeführte Vergleich der Aufspaltungen hinsichtlich der redistributiven Terme verdeutlicht, dass die untersuchten Parametrisierungen sowohl die Verläufe von Π_{ij} als auch von $-\phi_{ij}$ prinzipiell wiedergeben können. Es zeigt sich, dass je nach Beitrag (Turbulenz, Scherung, Auftrieb) und betrachteter Komponente die Parametrisierungen den Verlauf der einen oder der anderen Aufspaltung besser reproduzieren können. Durch diesen

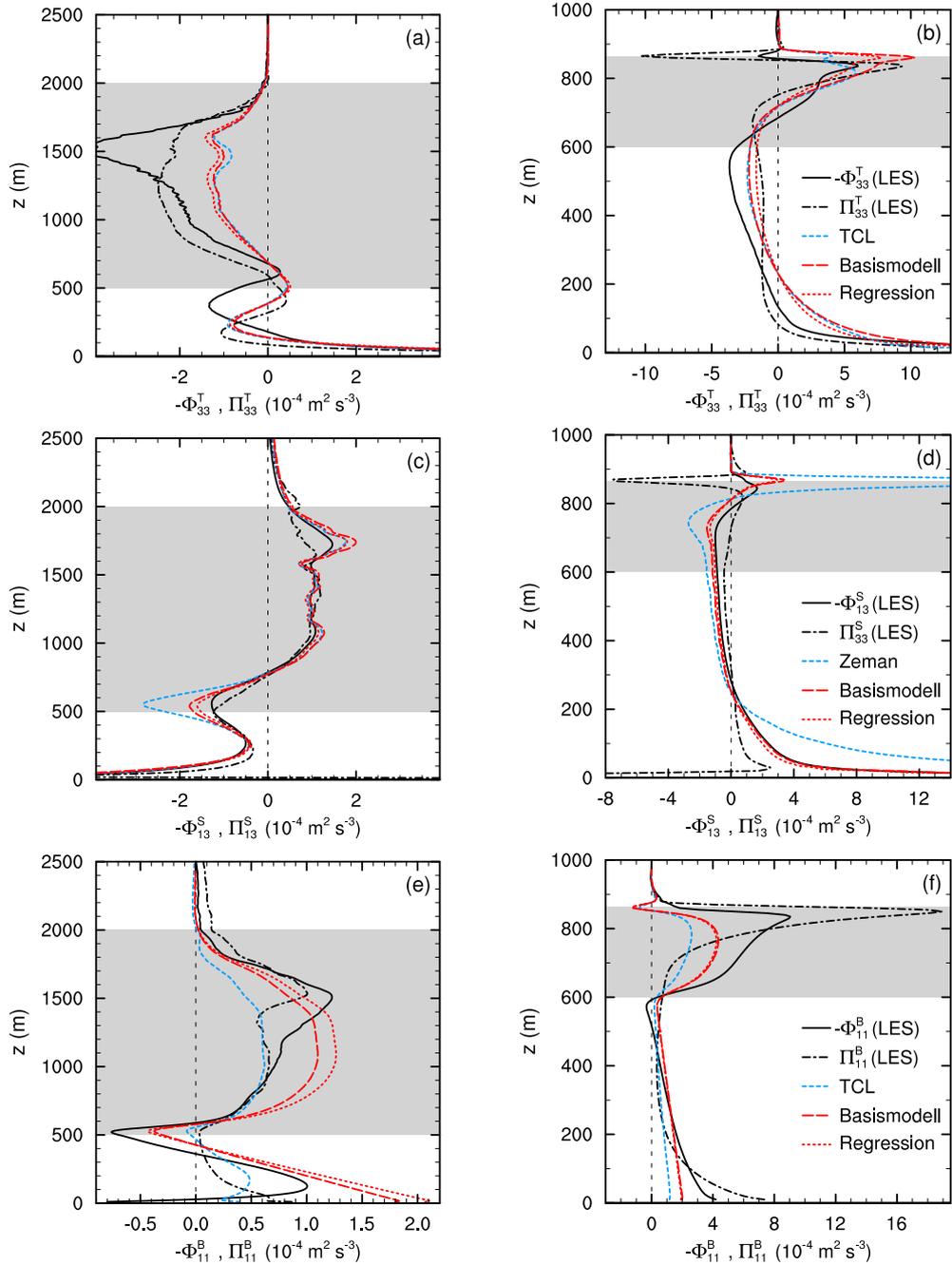


Abbildung 6.18: Deviatorische Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $-\phi_{33}^T$ für BO-MEX (a) und DYCOMS (b), $-\phi_{13}^S$ für BOMEX (c) und DYCOMS (d) sowie $-\phi_{11}^B$ für BOMEX (e) und DYCOMS (f). Schwarz durchgezogene Linien zeigen $-\phi_{33}^T$, $-\phi_{13}^S$ und $-\phi_{11}^B$ aus den LES-Daten, blaue Linien in (a), (b), (e) sowie (f) das TCL-Modell (6.8) bzw. (6.18) und in (c) und (d) die auf ZEMAN (1981) basierende Parametrisierung 6.13. Rote lang gestrichelte Linien zeigen die zum Basismodell zählenden Parametrisierungen an, welche in (a)-(b) (6.6) mit $C_T^u = 2.0$, in (c)-(d) (6.11) mit $C_S^u = 0.6$ und in (e)-(f) (6.16) mit $C_B^u = 0.5$ sind. Rote kurz gestrichelte Linien stellen die über lineare Regression an $-\phi_{33}^T$, $-\phi_{13}^S$ und $-\phi_{11}^B$ angepassten Formulierungen des Basismodells dar, wobei die optimalen Konstanten Tab. 6.4 zu entnehmen sind. Zu Vergleichszwecken sind auch die Druck-Geschwindigkeitsgradient-Kovarianzen Π_{33}^T in (a) u. (b), Π_{13}^S in (c) u. (d) sowie Π_{11}^B in (e) u. (f) eingetragen. Die Legenden beschreiben jeweils die Abbildungen in einer Zeile. Graue Bereiche und Mittelungszeiträume werden wie in Abb. 6.4 verwendet.

	$-\phi_{11}$	$-\phi_{22}$	$-\phi_{33}$	$-\phi_{12}$	$-\phi_{13}$	$-\phi_{23}$	Lit.
C_T^u (B)	2.02±1.12	2.00±0.90	2.23±1.24	1.29±1.37	1.93±1.28	1.94±1.73	1–3
C_T^u (D)	2.12±1.02	1.63±1.20	1.51±1.21	1.32±0.66	0.86±0.65	1.83±1.74	
C_S^u (B)	0.56±0.50	1.31±1.20	1.27±1.12	0.77±0.78	0.54±0.13	0.63±0.61	0.6
C_S^u (D)	1.51±0.89	0.95±0.80	0.29±1.32	0.80±0.71	0.52±0.42	0.84±0.66	
C_B^u (B)	0.58±0.41	0.52±0.48	0.51±0.42	-	0.72±0.61	0.49±0.47	0.5–0.6
C_B^u (D)	0.49±0.22	0.52±0.24	0.50±0.22	-	0.49±0.16	0.82±0.45	

Tabelle 6.4: Werte der an die deviatorischen Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianzen $-\phi_{ij}^T$, $-\phi_{ij}^S$ und $-\phi_{ij}^B$ angepassten Modellierungskonstanten C_T^u , C_S^u und C_B^u mit ihren Standardabweichungen für BOMEX (B) und DYCOMS (D). Es handelt sich um die Konstanten der Parametrisierungen 6.6, 6.11 und 6.16 des Basismodells. Zur Anpassung wurde lineare Regression verwendet. Die Literaturwerte (Lit.) für C_T^u entstammen ZEMAN (1981), die für C_S^u und C_B^u sind HANJALIĆ und LAUNDER (2011, S. 68 bzw. S. 120) entnommen.

Vergleich kann aufgezeigt werden, wie groß die Differenzen zu den Parametrisierungen in Abhängigkeit von der Wahl der Aufspaltung sind. Letztlich kann aber eine Abwägung zur Verwendung der einen oder der anderen Aufspaltung nur auf Basis von theoretischen Argumenten getroffen werden (siehe auch Abschnitt 6.3).

6.6 Schlussfolgerungen für die Modellierung von Druck-Kovarianzen

Die Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen sind in den Bilanzen der Impuls- und Skalarflüsse dafür verantwortlich, die durch die primären Produktionsmechanismen Scherung und Auftrieb erzeugten Anisotropien der Strömung auszugleichen. Damit besitzen sie eine große Bedeutung für die sich aus einem Gleichgewicht der Bilanzen einstellenden turbulenten Flüsse. Im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung ist daher auch ihre möglichst genaue Modellierung ein zentrales Anliegen. Diesem Anliegen wird durch die Zerlegung der Druck-Kovarianzen in verschiedene Anteile, die je einem Einzelprozesse zugeordnet werden, und der separaten Parametrisierung der Einzelprozesse begegnet. Das Modell für die totalen Druck-Kovarianzen, die letztlich im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung benötigt werden, besteht dann aus der Summe der jeweiligen Einzelansätze. Inwiefern einige der ohne Berücksichtigung von Kondensationsprozessen aufgestellten Modelle für die Druck-Kovarianzen auch bei bewölkten Grenzschichten anwendbar sind, ist eine zentrale Fragestellung der vorliegenden Arbeit. Sie wird nachfolgend basierend auf den in diesem Kapitel erzielten Ergebnissen beantwortet, woraus sich generelle Schlussfolgerungen für die Modellierung der Druck-Kovarianzen bei bewölkten Grenzschichten ergeben.

Die Zerlegung der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen Π_{ij} zeigt, dass bei bewölkten Grenzschichten die Beiträge aufgrund von turbulenten Interaktionen Π_{ij}^T , Scherung Π_{ij}^S und Auftrieb Π_{ij}^B die maßgeblichen Anteile sind und der Anteil aufgrund von Corioliskraft

Π_{ij}^C vernachlässigbar ist und somit keine Berücksichtigung erfordert. Dabei sind nicht alle der drei maßgeblichen Anteile über die gesamte Grenzschicht betrachtet von gleicher Bedeutung. Während der Scherungsanteil hauptsächlich in der Nähe der Oberfläche entscheidend ist, ist er innerhalb der Wolkenschichten von untergeordneter Bedeutung. In diesen Schichten liegen der Auftriebsanteil und der turbulente Anteil in etwa derselben Größenordnung.

Die einzelnen Beiträge der Druck-Temperatur- und Druck-Feuchte-Kovarianzen, Π_{θ_i} und Π_{q_i} , besitzen für beide Skalare jeweils dieselbe relative Bedeutung und analoge Verläufe, sodass bei der Modellierung die Druck-Skalar-Kovarianzen Π_{s_i} allgemein behandelt werden können und nicht prinzipiell zwischen den beiden Skalaren unterschieden werden muss. Dabei unterscheidet sich die Zerlegung der vertikalen Druck-Skalar-Kovarianz von der Zerlegung der horizontalen Komponenten. Bei Π_{s_3} dominiert der Auftriebsanteil im Inversionsbereich. Unterhalb sind der turbulente Anteil und der Auftriebsanteil in etwa gleich wichtig. Der Scherungsanteil $\Pi_{s_3}^S$ ist bei der Kumulus- und der Stratokumulus-bedeckten Grenzschicht vernachlässigbar. In den horizontalen Komponenten Π_{s_1} und Π_{s_2} sind die Anteile aufgrund von Turbulenz, Scherung und Auftrieb in etwa gleich bedeutend. Dabei sei hier betont, dass auch die horizontalen Komponenten einen nicht zu vernachlässigen Auftriebsanteil besitzen, welcher ebenfalls bei der Modellierung berücksichtigt werden sollte.

Im Hinblick auf die Parametrisierung der totalen Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen Π_{ij} und Π_{s_i} von bewölkten Grenzschichten ist es ausreichend, die jeweils maßgeblichen Anteile, welche in Abhängigkeit von den Komponenten die Beiträge aufgrund von Turbulenz, Scherung und Auftrieb sind, zu berücksichtigen. Der Beitrag durch die Corioliskraft ist bei den hier untersuchten Grenzschichten, die typisch für tropische und subtropische Breiten sind, vernachlässigbar. MIRONOV (2001) zeigt, dass der Beitrag an den Druck-Kovarianzen durch den Einfluss der Corioliskraft bei einem Coriolisparameter von $f = 2 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ signifikant wird. Da der Coriolisparameter selbst in hohen Breiten in der Größenordnung von 10^{-4} s^{-1} liegt und damit zwei Größenordnungen kleiner als der bei MIRONOV (2001) verwendete Wert ist, wird keine signifikante Breitenabhängigkeit des Coriolisanteils bei atmosphärischen Bedingungen erwartet. Folglich ist es generell nicht notwendig, den Coriolisanteil der Druck-Kovarianzen bei der Modellierung atmosphärischer Turbulenz zu berücksichtigen.

Um die Gültigkeit gängiger Parametrisierungen der einzelnen Anteile für bewölkte Grenzschichten zu überprüfen, wurde ein Vergleich mit den LES-Daten durchgeführt. Dabei kommen einerseits die Ansätze des Basismodells zum Einsatz, die derzeit bereits für die Turbulenzschließung in der Wettervorhersage verwendet werden. Andererseits wird das nicht-lineare TCL-Modell für den turbulenten Anteil und den Auftriebsanteil mit den LES-Daten verglichen, welches sich in vielen Anwendungen gegenüber anderen, nicht-linearen Ansätzen als überlegen erwiesen hat.

Beim Anteil aufgrund von turbulenten Interaktionen ergibt der Vergleich mit den LES-Daten, dass die Parametrisierung des Basismodells für die Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen die LES-Daten mit etwa derselben Genauigkeit wie das TCL-Modell abbilden kann. Dabei sind diese Modelle nicht perfekt, geben aber den Verlauf der LES-Daten qualitativ wieder. Dies gilt abgesehen vom Inversionsbereich der Grenzschichten auch für die Druck-Skalar-Kovarianzen. Im Bereich der Inversion ist zwar der Anteil der vertikalen Druck-Skalar-Kovarianz vernachlässigbar, sodass auch seine Modellierung von untergeordneter Bedeutung ist, dies gilt aber nicht für die horizontalen Komponenten. Folglich sollte die Modellierung des turbulenten Anteils der Druck-Skalar-Kovarianzen noch weiter ver-

bessert werden. Die Verwendung des komplexeren TCL-Modells gegenüber der einfacheren Parametrisierung des Basismodells bringt keine Verbesserung, sodass für den turbulenten Anteil der Druck-Kovarianzen auch bei bewölkten Grenzschichten das Basismodell empfohlen wird.

Der Scherungsanteil der Druck-Kovarianzen kann sowohl mit der linearen IP-Parametrisierung des Basismodells als auch mit der linearen, auf ZEMAN (1981) basierenden Formulierung in fast allen Komponenten in guter funktionaler Übereinstimmung mit den LES-Daten wiedergegeben werden. Da der Scherungsanteil der Druck-Kovarianzen vornehmlich in Oberflächennähe von Bedeutung ist, ist seine Modellierung vor allem in diesem Bereich wichtig. In der Komponente Π_{33}^S weist Zemans Formulierung in diesem Bereich gegenüber der IP-Parametrisierung einen korrekten Verlauf auf, sodass Zemans Parametrisierung der IP-Parametrisierung vorgezogen werden sollte. Es ist wichtig festzuhalten, dass die linearen Modelle beim Scherungsanteil generell in der Lage sind, die LES-Daten in hoher Übereinstimmung wiederzugeben und damit für die Turbulenzmodellierung bspw. in der Wettervorhersage eingesetzt werden können.

Bei den Diagonalkomponenten des Auftriebsanteils der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen sind sowohl das Basismodell als auch das TCL-Modell nicht in der Lage, den funktionalen Verlauf der LES-Daten wiederzugeben. Sie können lediglich einen groben Anhaltspunkt liefern. Auch wenn der Auftriebsanteil bei den Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen nicht so dominant wie bei der vertikalen Druck-Skalar-Kovarianz ist, sollte eine Verbesserung für die Diagonalkomponenten dennoch angestrebt werden. Das Basismodell und das TCL-Modell können die Nebendiagonalkomponenten des Auftriebsanteils in guter Übereinstimmung mit den LES-Daten in etwa gleich gut wiedergeben. Daher ist es für die Anwendung bspw. in der Wettervorhersage ausreichend das einfachere, lineare Basismodell zu verwenden. Der Auftriebsanteil der vertikalen Druck-Skalar-Kovarianz wird mit dem Basismodell deutlich besser als mit dem TCL-Modell berücksichtigt. Es zeigt sich, dass der Auftriebsanteil ca. die Hälfte der Auftriebsproduktion in der vertikalen skalaren Bilanzgleichung kompensiert und vom Basismodell sehr gut wiedergegeben wird. Die horizontalen Komponenten werden im Basismodell unzureichend reproduziert. Dieses Ergebnis zeigt, dass das Basismodell für horizontale Komponenten zu stark vereinfachend ist. Auch das TCL-Modell kann hier lediglich einen groben Anhaltspunkt liefern. An dieser Stelle sollte angesetzt werden, um die Modellierung der horizontalen Komponenten zu verbessern.

Die sich je nach Aufspaltung der Geschwindigkeits-Druckgradient-Kovarianz $\tilde{\phi}_{ij}$ einstellenden, redistributiven Terme Π_{ij} und ϕ_{ij} und ihre jeweiligen Anteile unterscheiden sich hauptsächlich in der Nähe der Oberfläche und am Oberrand der Grenzschichten voneinander. Da beide Terme redistributiv sind, werden sie in der Regel mit denselben Modellen abgebildet. Die aus linearer Regression erhaltenen, optimalen Modellierungskonstanten des Basismodells unterscheiden sich in Abhängigkeit davon, mit welcher Zerlegung die Anpassung erfolgt und hängen auch davon ab, welche Komponente und welches Skalar betrachtet wird. Der Bereich der auftretenden Werte ist teilweise größer als der in der Literatur angegebene Bereich und zeigt, dass nicht alle Komponenten mit demselben Wert der Konstante optimal abgebildet werden können.

Für die Parametrisierung der totalen Druck-Kovarianzen im Rahmen der Schließung zweiter Ordnung ist nun die Summe aller Anteile mit ihren jeweiligen Parametrisierungen entscheidend, wobei die einzelnen Anteile je nach relativem Beitrag an den totalen Druck-Kovarianzen eingehen. Im Rahmen dieser Arbeit wird das Gesamtmodell der Druck-Kovarianzen als Summe der Modelle der Einzelprozesse nicht mit den LES-Daten verglichen, da der Ansatz zur Modellierung der Druck-Kovarianzen bei den Einzelpro-

zessen ansetzt. Wenn die Reproduktion der Einzelprozesse maßgeblicher Beiträge bereits unzureichend ist, dann bildet auch das Gesamtmodell diese Probleme ab. Daher bringt die Diskussion des Gesamtmodells keine neuen Erkenntnisse, weil sie wieder zu den bereits diskutierten Modellen der Anteile führt.

Insgesamt betrachtet kann das Basismodell (abgesehen für die Auftriebsanteile der horizontalen Druck-Kovarianzen) die drei wesentlichen Anteile aufgrund von turbulenten Interaktionen, Scherung und Auftrieb qualitativ wiedergeben und ist für einige Komponenten und Anteile dem komplexeren, nicht-linearen TCL-Modell sogar überlegen. Daher können die linearen Ansätze, die Einfachheit und qualitative Genauigkeit kombinieren (HANJALIĆ und LAUNDER, 2011, S. 68), auch für bewölkte Grenzschichten eingesetzt werden.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel der vorliegenden Arbeit bestand darin, eine umfassende Auswertung von Bilanzen der statistischen Momente zweiter Ordnung für bewölkte Grenzschichten vorzunehmen. Diese Auswertung wurde verwendet, um Modellierungsansätze für Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen zu überprüfen. Dafür wurden Large-Eddy Simulationen von zwei typischen Konvektionsregimen (Kumulus- und Stratokumulus-bedeckte Grenzschicht über dem Meer in der Passatwindregion) durchgeführt. Die Simulationen basierten auf Vorgaben von zwei LES-Modellvergleichsstudien, die sich auf beobachtete Fälle stützen. Es wurde gezeigt, dass die mit dem verwendeten LES-Modell PALM erzielten Ergebnisse in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der anderen Modellteilnehmer stehen.

Die Ensemble-gemittelten Bilanzgleichungen, welche die Basis für Turbulenzmodelle darstellen, wurden während der LES-Simulation als horizontales und zeitliches Mittel angenähert. Insgesamt wurden Bilanzen von sechzehn Momenten zweiter Ordnung bestimmt, wozu die Varianzen der Geschwindigkeitskomponenten, der potentiellen Flüssigwassertemperatur und des Gesamtwassergehalts, die Kovarianz aus Flüssigwassertemperatur und Gesamtwassergehalt, die turbulente kinetische Energie sowie die vertikalen und horizontalen Impuls-, Temperatur- und Feuchteflüsse zählen. Die in die Bilanzen der Flüsse eingehenden Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen wurden in ihre Anteile aufgrund von turbulenten Interaktionen, Scherung, Auftrieb und Corioliskraft zerlegt. Diese Zerlegung ermöglichte es, Parametrisierungen für Druck-Kovarianzen zum ersten Mal für bewölkte Grenzschichten zu überprüfen. Dabei beruht die Modellierung dieser Terme bei der Schließung zweiter Ordnung darauf, für jeden Beitrag der Druck-Kovarianzen eine eigene Parametrisierung zu verwenden und ein Modell für die totale Druck-Kovarianz aus der Summe der Einzelmodelle abzuleiten. Auf generelle Eignung für die Parametrisierung von Druck-Kovarianzen in bewölkten Grenzschichten wurden zwei gängige Ansätze untersucht: das häufig eingesetzte Basismodell und das komplexere, nicht-lineare TCL-Modell. Die im Basismodell benötigten, empirischen Modellierungskonstanten wurden durch Anpassung der Parametrisierungen an die LES-Daten über lineare Regression ermittelt und mit Literaturwerten verglichen.

Die Auswertung der Bilanzen der Momente zweiter Ordnung zeigte in Übereinstimmung mit der Literatur, dass die Terme aufgrund von Scherung, Auftrieb und Dissipation in den Bilanzen von zentraler Bedeutung sind, da sie für die direkte Produktion oder Vernichtung der Momente verantwortlich sind. Die Umverteilung der Momente durch turbulenten Transport aus Höhenbereichen mit viel Produktion in Höhenbereiche mit weniger Produktion, zeigt sich vor allem in den horizontalen Impuls- und Skalarflüssen von entscheidender Bedeutung. Der Transport durch turbulente Druckfluktuationen stellt sich als maßgeblicher Prozess vor allem in den Bilanzen der vertikalen Impulsflüsse heraus. Die Aufgabe der Druck-Kovarianzen besteht darin, die durch das Wirken von Auftrieb und Scherung erzeugten Anisotropien der Grenzschichtströmung zu verringern. Es konnte gezeigt werden, dass die damit verbundene Umverteilung der Momente zwischen den einzelnen Komponenten einen wichtigen Prozess in den Bilanzen der Flüsse von bewölkten Grenzschichten darstellt. Für die Turbulenzmodellierung ließ sich aus der Analyse der Bilanzen folgern, dass auch in vereinfachten Turbulenzparametrisierungen zweiter Ordnung, wie sie häufig im Wettervorhersagemodell eingesetzt werden, Transport- und Umverteilungsmechanismen nicht

komplett vernachlässigt werden sollten.

Die Zerlegung der Druck-Kovarianzen veranschaulichte, dass die Anteile aufgrund von turbulenten Interaktionen, Scherung und Auftrieb bei den untersuchten Kumulus- und Stratokumulus-bedeckten Grenzschichten die wichtigsten Beiträge sind. Dabei variiert ihre relative Gewichtung zueinander in Abhängigkeit von der Höhe. Die Anteile der Druck-Temperatur- und Druck-Feuchte-Kovarianzen weisen analoge Verläufe zueinander auf. Daraus folgt, dass Druck-Temperatur- und Druck-Feuchte-Kovarianzen bei der Modellierung nicht prinzipiell unterschieden werden müssen.

Der Vergleich der LES-Daten mit den Parametrisierungen des Basismodells und des TCL-Modells ergab für den turbulenten Anteil der Druck-Kovarianzen, dass beide Modelle den Verlauf der LES-Daten qualitativ und mit etwa derselben Güte wiedergeben können. Da das komplexere TCL-Modell gegenüber dem einfacheren Basismodell keine Verbesserung bringt, sollte im Anwendungsfall auf die einfachere Formulierung zurückgegriffen werden. Für den Scherungsanteil wurde keine Parametrisierung des TCL-Modells verwendet und mit dem Basismodell verglichen sondern eine lineare Parametrisierung, die im Gegensatz zum Basismodell Scherungs- und Rotationsanteile explizit unterscheidet. Es zeigte sich, dass beide linearen Parametrisierungen den funktionalen Verlauf der LES-Daten größtenteils gut wiedergeben können und sich kaum unterscheiden. Daher sind sie auch für bewölkte Grenzschichten geeignet. Beim Auftriebsanteil ergab sich ein heterogenes Bild. Die Diagonalkomponenten des Auftriebsanteils der Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen können weder vom Basismodell noch vom TCL-Modell funktional abgebildet werden. Sie liefern lediglich einen groben Anhaltspunkt, sodass eine Weiterentwicklung dieser Parametrisierung angeraten wird. Die Nebendiagonalkomponenten des Auftriebsanteils können wiederum vom Basismodell und vom TCL-Modell qualitativ etwa gleich gut reproduziert werden. Bei Betrachtung des Auftriebsanteils der Druck-Skalar-Kovarianzen ergab sich, dass die vertikale Komponente circa die Hälfte der Auftriebsproduktion in der skalaren Bilanz kompensiert und mit dem Basismodell sehr gut wiedergegeben werden kann. Der Auftriebsanteil der horizontalen Komponenten ist aufgrund der Umverteilung aus der vertikalen Komponente von Null verschieden. Das Basismodell nimmt bei diesen Komponenten aber an, dass sie Null sind und ist somit zu stark vereinfachend. Das TCL-Modell liefert zwar einen Verlauf ungleich Null, ist aber nicht in der Lage, den Auftriebsanteil der horizontalen Komponenten in funktionaler Übereinstimmung mit den LES-Daten abzubilden. Daher sollte Weiterentwicklung bei diesen Komponenten ansetzen. Die für das Basismodell über lineare Regression ermittelten Modellierungskonstanten sind nicht für alle Komponenten und Skalare gleich. Ihr Wertebereich ist teilweise größer als der in der Literatur angegebene Bereich und spiegelt damit wieder, dass das Basismodell nicht für alle Komponenten auf einmal gleich gut geeignet sein kann.

Insgesamt konnte dargelegt werden, dass das häufig verwendete Basismodell die drei wesentlichen Anteile der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen größtenteils qualitativ wiedergeben kann und, abgesehen von einzelnen Anteilen in einigen Komponenten, auch für die Turbulenzmodellierung von bewölkten Grenzschichten prinzipiell geeignet ist. Das TCL-Modell weist trotz seiner höheren Komplexität gegenüber dem Basismodell nur in einigen Komponenten eine bessere Übereinstimmung mit der LES auf.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Parametrisierungen für Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen überprüft, und es wurde aufgezeigt, für welche Komponenten Bedarf an Verbesserung besteht. Dies kann nur ein erster Schritt dahingehend sein, die Formulierungen konkret weiterzuentwickeln, um zu besserer Berücksichtigung des Effekts der turbulenten Druckfluktuationen in Turbulenzmodellen beizutragen. Es könnte zum Bei-

spiel beim Auftriebsanteil der horizontalen Komponenten der Druck-Skalar-Kovarianzen angesetzt werden und basierend auf der kompakten Formulierung des TCL-Modells eine verbesserte Formulierung entwickelt werden.

Die einzelnen Beiträge der Druck-Geschwindigkeits- und Druck-Skalar-Kovarianzen sind, abgesehen von den in dieser Arbeit untersuchten feucht-konvektiven Situationen, für atmosphärische Anwendungen bisher nur für konvektive (MOENG, 1986; MIRONOV, 2001) und neutrale (ANDRÉN und MOENG, 1993) Grenzschichten bestimmt und untersucht worden. Da aber auch stabil geschichtete Grenzschichten im Turbulenzmodell berücksichtigt werden sollten (z.B. BAKLANOV *et al.*, 2012), kann ein nächster Schritt die Bestimmung und Untersuchung der Druck-Kovarianzen für stabile Situationen sein. Sowohl im Zusammenhang mit stabilen als auch mit konvektiven Grenzschichten ist der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten (MIRONOV und SULLIVAN, 2010; VAN HEERWAARDEN und DE ARELLANO, 2008) auf die Strömung und damit auch auf die Turbulenzmodellierung ein interessanter Aspekt, dessen Bearbeitung weiteren Fortschritt bezüglich der Verbesserung von Turbulenzmodellen bringen kann. Ebenso wäre es denkbar, die bereits untersuchten Kumulus- und Stratokumulus-bedeckten Grenzschichten der Passatwindzone um die Untersuchung eines dritten, für diese Region typischen Regimes zu erweitern, welches den Übergang von Stratokumulus- zu Kumulusbewölkung beinhaltet.

Wie in der Einleitung (Kap. 1) beschrieben wurde, ergeben sich bei der Schließung zweiter Ordnung drei Gruppen an Unbekannten, die parametrisiert werden müssen. Zusätzlich zu den in dieser Arbeit untersuchten Druck-Kovarianzen müssen noch die Transportterme sowie die Dissipationsraten behandelt werden. Auch Parametrisierungen für diese Terme können für die bewölkten Grenzschichten mit LES überprüft und weiterentwickelt werden. Mit den daraus gewonnenen Erkenntnissen könnte dann das Zusammenspiel der einzelnen Parametrisierungen eines Turbulenzmodells zweiter Ordnung konkret, zum Beispiel in einem Wettervorhersagemodell, betrachtet werden, um damit Verbesserungen für die Vorhersage zu erzielen.

In Wetter- und Klimamodellen, in denen das komplette Spektrum der Turbulenz häufig über Turbulenzmodelle zweiter Ordnung berücksichtigt wird, werden sich die Gitterweiten zukünftig aufgrund steigender Rechnerkapazitäten immer weiter verringern können. Damit werden diese Modelle immer weiter in Regionen vordringen, in denen ein Großteil der Turbulenz der Strömung direkt vom Modell aufgelöst werden kann und somit nur noch ein Teil des Turbulenzspektrums modelliert werden muss, welches Charakteristika von Large-Eddy Simulationen sind. Auch für LES-Modelle wird die Schließung zweiter Ordnung zunehmend erfolgreich verwendet (z.B. RAMACHANDRAN und WYNGAARD, 2011). Daher liegt in der Weiterentwicklung der Schließung zweiter Ordnung für LES-artige Wetter- und Klimamodelle ein weiterer Ansatzpunkt, die im Rahmen dieser Arbeit gewonnen Erkenntnisse einzubringen und zu erweitern.

Diese Arbeit demonstriert, dass die Bilanzen der Momente höherer Ordnung von essentieller Bedeutung sind, um die physikalischen Prozesse in der turbulenten Grenzschicht zu verstehen und hierüber die atmosphärische Turbulenzmodellierung in Wetter- und Klimamodelle zu verbessern.

A Anhang

A.1 Herleitung von Bilanzgleichungen am Beispiel der skalaren Varianz

Im Folgenden wird die Frage behandelt, wie mittels LES-Daten eine Näherung an die Ensemble-gemittelten Bilanzgleichungen erhalten werden kann. Diese Vorgehensweise basiert auf MIRONOV *et al.* (2000) und MIRONOV (2001). Sie wird anhand der Bilanzgleichung für die skalare Varianz vorgestellt, welches der Darstellung in MIRONOV und SULLIVAN (2010) folgt.

Zunächst wird aus der gefilterten Erhaltungsgleichung für ein Skalar, welches in dieser Arbeit entweder $\bar{\theta}_1$ (Gl. 2.20) oder \bar{q} (Gl. 2.21) ist und allgemein mit der Variablen \bar{s} abgekürzt wird, die Bilanzgleichung für die aufgelöste Varianz $\langle \bar{s}''^2 \rangle$ in ihrer üblichen Weise hergeleitet, die z.B. ausführlich bei STULL (1988, Kap. 4.3.2) oder TENNEKES und LUMLEY (1972, Kap. 3) ausgeführt wird. Dazu wird die gefilterte Transportgleichung für \bar{s}

$$\frac{\partial \bar{s}}{\partial t} = -\frac{\partial (\bar{u}_k \bar{s})}{\partial x_k} - \frac{\partial \tau_{sk}}{\partial x_k} \quad (\text{A.1})$$

horizontal gemittelt. Die sich daraus ergebende Gleichung wird von (A.1) abgezogen, woraus sich die Bilanzgleichung für \bar{s}'' ergibt. Diese Gleichung wird mit \bar{s}'' multipliziert und horizontal gemittelt, woraus sich unter Anwendung der Reynoldsschen Mittelbildungsregeln (Gl. 3.3-3.8)

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle \bar{u}_k \rangle \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \langle \bar{s}''^2 \rangle = -\langle \bar{u}_k' \bar{s}'' \rangle \frac{\partial \langle \bar{s} \rangle}{\partial x_k} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \bar{u}_k' \bar{s}''^2 \rangle - \left\langle \bar{s}'' \frac{\partial \tau_{sk}''}{\partial x_k} \right\rangle \quad (\text{A.2})$$

ergibt. $\langle \tau_{sk} \rangle = \langle \bar{u}_k' s' \rangle$ ist der SGS-Skalarfluss, der im Subskalenmodell mit einem Gradientensatz behandelt wird (siehe auch Kap. 2.3). Die zeitliche Änderung und die Advektion (linke Seite von (A.2)) werden durch die Produktion von aufgelöster Varianz durch den mittleren Gradienten, den aufgelösten Transport sowie einem dritten Term, dessen Bedeutung später diskutiert wird, ausgeglichen.

Zusätzlich zur aufgelösten Skala ergibt sich bei der LES durch die Filterung der Navier-Stokes-Gleichungen noch die SGS-Skala. Die Transportgleichung für die skalare SGS-Varianz $\langle \zeta \rangle = \langle \overline{s'^2} \rangle$ lässt sich ebenfalls nach der soeben beschriebenen Vorgehensweise herleiten. Diese und weitere SGS-Transportgleichungen werden z.B. bei DEARDORFF (1973) beschrieben. Wird nun die unter Gl. 2.6 bei DEARDORFF (1973) angegebene Gleichung für die skalare SGS-Varianz horizontal gemittelt, folgt

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle \bar{u}_k \rangle \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \langle \zeta \rangle = -\left\langle \tau_{sk} \frac{\partial \bar{s}}{\partial x_k} \right\rangle - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\langle \bar{u}_k' \zeta'' \rangle + \langle \bar{u}_k' s'^2 \rangle \right] - \langle \epsilon_s \rangle, \quad (\text{A.3})$$

wobei $\langle \bar{u}_k' s'^2 \rangle$ den SGS-Fluss von ζ (SGS-Dreifachkorrelation) darstellt und $\langle \epsilon_s \rangle$ die Disipationsrate der skalaren Varianz ist.

Der erste Term auf der rechten Seite von (A.3) lässt sich durch Anwendung der Mittelbildungsregeln (Gl. 3.3-3.8) sowie der Differentiationsregeln wie folgt umformen:

$$-\left\langle \tau_{sk} \frac{\partial \bar{s}}{\partial x_k} \right\rangle = -\langle \tau_{sk} \rangle \frac{\partial \langle \bar{s} \rangle}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \langle \bar{s}'' \tau_{sk}'' \rangle + \left\langle \bar{s}'' \frac{\partial \tau_{sk}''}{\partial x_k} \right\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Wird nun (A.4) in (A.3) eingesetzt, folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle \bar{u}_k \rangle \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \langle \zeta \rangle &= -\langle \tau_{sk} \rangle \frac{\partial \langle \bar{s} \rangle}{\partial x_k} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\langle \bar{u}_k'' \zeta'' \rangle + 2 \langle \bar{s}'' \tau_{sk}'' \rangle + \langle \overline{u_k' s'^2} \rangle \right] \\ &\quad - \langle \epsilon_s \rangle + \left\langle \bar{s}'' \frac{\partial \tau_{sk}''}{\partial x_k} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Der erste Term auf der rechten Seite stellt die Produktion bzw. Vernichtung von SGS-Varianz durch den mittleren Gradienten dar. Der Transport der SGS-Varianz wird durch den zweiten Term repräsentiert. Der letzte Term auf der rechten Seite von (A.5) entspricht dem letzten Term von (A.2), allerdings mit umgekehrtem Vorzeichen. Interpretieren lässt sich dieser als Wechselwirkungsterm, der den Transfer von skalarer Varianz zwischen aufgelöster und SGS-Skala bewirkt (MIRONOV und SULLIVAN, 2010). Folglich verschwindet dieser Term, wenn die Bilanzgleichung für die gesamte (totale) skalare Varianz $\langle \bar{s}''^2 \rangle + \langle \zeta \rangle$ betrachtet wird, die sich aus Addition von (A.2) und (A.5) zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle \bar{u}_k \rangle \frac{\partial}{\partial x_k} \right) (\langle \bar{s}''^2 \rangle + \langle \zeta \rangle) &= -(\langle \bar{u}_k'' \bar{s}'' \rangle + \langle \tau_{sk} \rangle) \frac{\partial \langle \bar{s} \rangle}{\partial x_k} \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\langle \bar{u}_k'' \bar{s}''^2 \rangle + \langle \bar{u}_k'' \zeta'' \rangle + 2 \langle \bar{s}'' \tau_{sk}'' \rangle + \langle \overline{u_k' s'^2} \rangle \right] - \langle \epsilon_s \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

ergibt. Das zeitliche Mittel der Terme auf der rechten Seite von (A.6) wird als Näherung der Produktion bzw. Vernichtung durch den mittleren Gradienten, des Transports sowie der Dissipation der Ensemble-gemittelten Gleichung der skalaren Varianz behandelt.

In dieser Arbeit ergeben sich aufgrund der periodischen Randbedingungen in den horizontalen Richtungen sowie einem im horizontalen Mittel verschwindenden mittleren vertikalen Wind ($\langle \bar{u}_3 \rangle = 0$) Vereinfachungen für die Bilanzgleichung A.6, die dann mit diesen Vereinfachungen

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \bar{s}''^2 \rangle + \langle \zeta \rangle) &= -(\langle \bar{u}_3'' \bar{s}'' \rangle + \langle \tau_{s3} \rangle) \frac{\partial \langle \bar{s} \rangle}{\partial x_3} \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \bar{u}_3'' \bar{s}''^2 \rangle + \langle \bar{u}_3'' \zeta'' \rangle + 2 \langle \bar{s}'' \tau_{s3}'' \rangle + \langle \overline{u_k' s'^2} \rangle \right] - \langle \epsilon_s \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

lautet. Da die Schließung von PALM nur 1.5-facher Ordnung ist, wird keine prognostische Gleichung für ζ gelöst. Eine grobe Abschätzung für ζ folgt aber aus der Annahme, dass auf der Subgridskala Produktion und Dissipation von skalarer Varianz im Gleichgewicht stehen und dort lokale Isotropie herrscht. Damit ergibt sich $\langle \zeta \rangle = 5 \langle \tau_{si}^2 / e \rangle$, wobei der Wert des Koeffizienten aus der Betrachtung des Spektrums der skalaren Varianz im Inertialbereich folgt (MOENG und WYNGAARD, 1988). Aus den soeben geschilderten Annahmen lässt sich auch eine Beziehung für die Dissipationsrate $\langle \epsilon_s \rangle$ ableiten, wenn der Gradientansatz $\tau_{si} = -K_h \partial \bar{s} / \partial x_i$ für den SGS-Fluss in (3.21) eingesetzt wird:

$$\langle \epsilon_s \rangle = \left\langle 2K_h \left(\frac{\partial \bar{s}}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle, \quad (\text{A.8})$$

welches bei PELTIER und WYNGAARD (1995) ausführlich hergeleitet und beispielsweise auch in CHEINET und SIEBESMA (2009) verwendet wird. $\langle \overline{u'_k s'^2} \rangle$, der SGS-Fluss von $\langle \zeta \rangle$, kann mittels PALM nicht bestimmt werden und geht damit ins Residuum ein.

A.2 Bestimmung von subskaligen Drucktermen

Die subskaligen Druck-Skalar-Kovarianzen

$$\mathcal{P}_{si} = \frac{1}{\rho_0} \left\langle s' \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right\rangle \quad (\text{A.9})$$

werden über einfache Parametrisierungen in den Bilanzgleichungen der skalaren Flüsse (Gln. 3.17 u. 3.18) berücksichtigt. Der Grund dafür ist, dass diese Terme bei LES mit moderater Auflösung besonders in Nähe der festen Oberfläche nicht vernachlässigbar sind (KHANNA, 1998; MIRONOV *et al.*, 2000; MIRONOV, 2001), wie auch Abb. 5.3 zeigt. Nichtberücksichtigung von \mathcal{P}_{si} führt dabei zu signifikanten Residuen in den Bilanzen. Um also in dieser Arbeit, die Bilanzen möglichst gut schließen zu können, werden die subskaligen Druck-Skalar-Kovarianzen \mathcal{P}_{si} über die in MIRONOV *et al.* (2000) und MIRONOV (2001) beschriebene Parametrisierung berücksichtigt. Sie basiert auf den Bilanzgleichungen für skalare SGS-Flüsse $\langle \tau_{si} \rangle$, die unter der Annahme horizontaler Homogenität und $\langle \overline{u_3} \rangle = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \tau_{si} \rangle = & - \left\langle \tau_{sk} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_k} \right\rangle - \left\langle \tau_{ik} \frac{\partial \overline{s}}{\partial x_k} \right\rangle + \frac{g}{\theta_0} \delta_{i3} \langle \tau_{vs} \rangle \\ & - \varepsilon_{ijm} f_j \langle \tau_{sm} \rangle - \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \overline{u'_3} \tau_{s3} \rangle + \langle \overline{u'_3 u'_i s'} \rangle \right] - \mathcal{P}_{si} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

lauten, wobei \overline{s} stellvertretend für die potentielle Flüssigwassertemperatur $\overline{\theta}_1$ und den Gesamtwassergehalt \overline{q} steht und τ_{vs} der SGS-Auftriebsterm ist (siehe Gln. 3.19 u. 3.20). MIRONOV *et al.* (2000) und MIRONOV (2001) zeigen unter der Annahme, dass $\frac{\partial}{\partial x_3} \langle \overline{u'_3 u'_i s'} \rangle$ klein ist, dass sich (A.10) zu einem Gleichgewicht zwischen mittleren Gradiententermen, Auftriebsterm und Druckterm reduziert. Damit lässt sich (A.10) zu

$$\mathcal{P}_{si} = - \left\langle \tau_{sk} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_k} \right\rangle - \left\langle \tau_{ik} \frac{\partial \overline{s}}{\partial x_k} \right\rangle + \delta_{i3} \frac{g}{\theta_0} \langle \tau_{vs} \rangle - \varepsilon_{ijm} f_j \langle \tau_{sm} \rangle \quad (\text{A.11})$$

umformen, wobei hier der Vollständigkeit halber auch der Coriolisterm mit berücksichtigt wird. Somit basiert die Approximation für \mathcal{P}_{si} also auf abgebrochenen Bilanzgleichungen der skalaren SGS-Flüsse.

Eine Parametrisierung für die subskalige Druck-Geschwindigkeits-Kovarianzen

$$\mathcal{P}_{ij} = \left\langle p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \quad (\text{A.12})$$

wird analog zur Parametrisierung für \mathcal{P}_{si} hergeleitet. Dabei gilt es zu beachten, dass \mathcal{P}_{ij} ein spurloser Tensor ist. Physikalisch betrachtet versucht \mathcal{P}_{ij} die Turbulenz in einen isotropen Zustand zurückzuführen (siehe z.B. STULL, 1988, S. 123). Folglich muss auch eine Parametrisierung für \mathcal{P}_{ij} spurlos sein. Daher wird eine Approximation basierend auf der Bilanzgleichung für den spurlosen, deviatorischen Anteil des SGS-Spannungstensors $\langle \tau_{ij} - 2/3 e \delta_{ij} \rangle$, der auch im Subskalenmodell von PALM parametrisiert wird (siehe Gl. 2.24), hergeleitet.

Die Bilanzgleichung für $\langle \tau_{ij} - 2/3 e \delta_{ij} \rangle$ folgt aus Addition der Gleichung für τ_{ij} , die z.B. in DEARDORFF (1973, Gl. 2.4) beschrieben wird und der SGS-TKE-Gleichung 2.23 und lautet nach horizontaler Mittelung und Ausnutzung der horizontalen Homogenität sowie $\langle \bar{u}_3 \rangle = 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \tau_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} e \right\rangle &= - \left\langle \tau_{jl} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_l} \right\rangle - \left\langle \tau_{il} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_l} \right\rangle + \frac{2}{3} \delta_{ij} \left\langle \tau_{kl} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_l} \right\rangle \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\langle \bar{u}_3'' \tau_{ij}'' \rangle + \langle \overline{u_3' u_i' u_j'} \rangle - \frac{2}{3} \delta_{ij} \langle \bar{u}_3'' e'' \rangle \right] \\
&\quad + \frac{g}{\theta_0} \left\langle \delta_{i3} \tau_{vj} + \delta_{j3} \tau_{vi} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \tau_{v3} \right\rangle \\
&\quad - \varepsilon_{ilm} f_l \langle \tau_{jm} \rangle - \varepsilon_{jlm} f_l \langle \tau_{im} \rangle + \mathcal{P}_{ij} \\
&\quad - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x_l} \left[\delta_{jl} \langle \overline{u_i' p'} \rangle + \delta_{il} \langle \overline{u_j' p'} \rangle \right] \\
&\quad + \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_l} \left[\langle \overline{u_l' e'} \rangle + \frac{1}{\rho_0} \langle \overline{u_l' p'} \rangle \right].
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Eine spurlose Parametrisierung von \mathcal{P}_{ij} ergibt sich aus (A.13) durch Vernachlässigung der Zeitabhängigkeit, der SGS-Dreifachkorrelation $\langle \overline{u_3' u_i' u_j'} \rangle$ und der beiden letzten Terme von (A.13) sowie Umstellen nach \mathcal{P}_{ij} . $\langle \overline{u_3' u_i' u_j'} \rangle$ sowie $\langle \overline{u_i' p'} \rangle$ können mit PALM nicht berechnet werden. Sie werden als klein angenommen, welches auch mit den Annahmen von DEARDORFF (1973) übereinstimmt. Der Term $\langle \overline{u_l' e'} \rangle + \frac{1}{\rho_0} \langle \overline{u_l' p'} \rangle$ wird zwar im SGS-Modell über einen Gradientansatz für die SGS-TKE e parametrisiert (siehe Gl. 2.30), muss aber für eine Parametrisierung von \mathcal{P}_{ij} auch vernachlässigt werden, um $\text{Spur}(\mathcal{P}_{ij}) = 0$ sicher zu stellen. Die SGS-Dreifachkorrelationen und SGS-Druckflüsse müssen also konsistenter Weise sowohl in der Gleichung für den SGS-Impulsfluss als auch für die SGS-TKE vernachlässigt werden. Damit folgt schließlich

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{ij} &= \left\langle \tau_{jl} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_l} \right\rangle + \left\langle \tau_{il} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_l} \right\rangle - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left\langle \tau_{kl} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_l} \right\rangle \\
&\quad - \frac{g}{\theta_0} \left\langle \delta_{i3} \tau_{vj} + \delta_{j3} \tau_{vi} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \tau_{v3} \right\rangle + \varepsilon_{ilm} f_l \langle \tau_{jm} \rangle + \varepsilon_{jlm} f_l \langle \tau_{im} \rangle
\end{aligned} \tag{A.14}$$

als Approximation für \mathcal{P}_{ij} und es gilt $\text{Spur}(\mathcal{P}_{ij}) = 0$.

Auswertungen von \mathcal{P}_{ij} und \mathcal{P}_{si} zeigen, dass ihr Einfluss mit steigender Auflösung abnimmt, sie aber in Nähe des Erdbodens signifikant bleiben und für eine gute Schließung der mit dem LES-Modell ermittelten Bilanzen berücksichtigt werden müssen.

Literaturverzeichnis

- Ackermann, A. S., M. C. vanZanten, et al., 2009:** Large-eddy simulations of drizzling, stratocumulus-topped marine boundary layer. — *Mon. Wea. Rev.*, **137**, 1083–1110.
- Andreas, E. L., 1987:** On the Kolmogorov constants for the temperature-humidity cospectrum and the refractive index spectrum. — *J. Atmos. Sci.*, **44**, 2399–2406.
- Andrén, A., C.-H. Moeng, 1993:** Single-point closure in a neutrally stratified boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **50**, 3366–3379.
- Arakawa, A., V. R. Lamb, 1977:** Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. — In: *General circulation models of the atmosphere*, J. Chang, Hsg., Academic Press, Bd. 17, S. 173–265.
- Baklanov, A. A., B. Grisogono, R. Bornstein, L. Mahrt, S. S. Zilitinkevich, P. T. S. E. Larsen, M. W. Rotach, H. J. S. Fernando, 2012:** The nature, theory, and modeling of atmospheric planetary boundary layers. — *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **92**, 123–128.
- Baldauf, M., 2008:** Stability analysis for linear discretisations of the advection equation with Runge-Kutta time integration. — *J. Comput. Phys.*, **227**, 6638–6659.
- Betts, A. K., 1973:** Non-precipitating cumulus convection and its parameterization. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **99**, 178–196.
- Bott, A., 1989a:** A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes. — *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1006–1016.
- Bott, A., 1989b:** Reply. — *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 2633–2636.
- Bradley, E. F., R. A. Antonia, A. J. Chambers, 1982:** Streamwise heat flux budget in the atmospheric surface layer. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **23**, 3–15.
- Bretherton, C. S., M. C. Wyant, 1997:** Moisture transport, lower-tropospheric stability, and decoupling of cloud-topped boundary layers. — *J. Atmos. Sci.*, **54**, 148–167.
- Breuer, M., 2002:** *Direkte Numerische Simulation und Large-Eddy Simulation turbulenter Strömungen auf Hochleistungsrechnern*. — Shaker Verlag Aachen, 431 S.
- Brost, R. A., J. C. Wyngaard, D. H. Lenschow, 1982:** Marine stratocumulus layers. Part II: turbulence budgets. — *J. Atmos. Sci.*, **39**, 818–836.
- Brown, A. R., 1999:** Large-eddy simulation and parameterization of the effects of shear on shallow cumulus convection. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **91**, 65–80.
- Buzzi, M., M. W. Rotach, M. Raschendorfer, A. A. M. Holtslag, 2011:** Evaluation of the COSMO-SC turbulence scheme in a shear driven stable boundary layer. — *Meteorol. Z.*, **40**, 335–350.

- Cheinet, S., A. P. Siebesma, 2009:** Variability of local structure parameters in the convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **66**, 1002–1017.
- Chlond, A., 1994:** Locally modified version of Bott's advection scheme. — *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 111–125.
- Chlond, A., A. Wolkau, 2000:** Large-eddy simulation of a nocturnal stratocumulus-topped marine atmospheric boundary layer: an uncertainty analysis. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **95**, 31–55.
- Chorin, A. J., 1968:** Numerical solution of the Navier-Stokes equations. — *Math. Comp.*, **22**, 745–762.
- Chorin, A. J., 1969:** On the convergence of discrete approximations to the Navier-Stokes equations. — *Math. Comp.*, **23**, 341–343.
- Chou, P.-Y., 1945:** On velocity correlations and the solutions of the equations of turbulent fluctuation. — *Quart. Appl. Math.*, **3**, 38–54.
- Conzemius, R. J., E. Fedorovich, 2006:** Dynamics of sheared convective boundary layer entrainment. Part I: Methodological background and large-eddy simulations. — *J. Atmos. Sci.*, **63**, 1151–1178.
- Courant, R., K. Friedrichs, H. Lewy, 1928:** Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. — *Math. Ann.*, **100**, 32–74.
- Craft, T. J., N. Z. Ince, B. E. Launder, 1996:** Recent developments in second-moment closure for buoyancy affected flows. — *Dyn. Atmos. Oceans*, **23**, 99–114.
- Craft, T. J., B. E. Launder, 2001:** Principles and performance of TCL-based second-moment closures. — *Flow Turbul. Combust.*, **66**, 355–372.
- Cuijpers, J. W. M., P. G. Duynkerke, 1993:** Large eddy simulation of trade wind cumulus clouds. — *J. Atmos. Sci.*, **50**, 3894–3908.
- Cuijpers, J. W. M., P. G. Duynkerke, F. T. M. Nieuwstadt, 1996:** Analyses of variance and flux budgets in cumulus-topped boundary layers. — *Atmos. Res.*, **40**, 307–337.
- Deardorff, J. W., 1970a:** A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds number. — *J. Fluid Mech.*, **41**, 453–480.
- Deardorff, J. W., 1970b:** Convective velocity and temperature scales for the unstable planetary boundary layer and for Rayleigh convection. — *J. Atmos. Sci.*, **27**, 1211–1213.
- Deardorff, J. W., 1973:** The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. — *J. Fluid Eng.*, **95**, 429–438.
- Deardorff, J. W., 1974a:** Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **7**, 81–106.
- Deardorff, J. W., 1974b:** Three-dimensional numerical study of turbulence in an entraining mixed layer. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **7**, 199–226.

- Deardorff, J. W., 1976:** Usefulness of liquid-water potential temperature in a shallow-cloud model. — *J. Appl. Meteor.*, **15**, 98–102.
- Deardorff, J. W., 1980:** Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **18**, 495–527.
- Durrán, D. R., 1999:** *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. — Springer-Verlag New York, 465 S.
- Dutton, J. A., G. H. Fichtl, 1969:** Approximate equations of motion for gases and liquids. — *J. Atmos. Sci.*, **26**, 241–254.
- Duynkerke, P. G., 1997:** Dynamics of cloudy boundary layers. — In: *Clear and cloudy boundary layers*, A. A. M. Holtslag, P. Duynkerke, Hsg., S. 199–218.
- Duynkerke, P. G., H. Zhang, P. J. Jonker, 1995:** Microphysical and turbulent structure of nocturnal stratocumulus as observed during ASTEX. — *J. Atmos. Sci.*, **52**, 2763–2777.
- Etling, D., 2002:** *Theoretische Meteorologie. Eine Einführung*. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, zweite Aufl., 354 S.
- Ferziger, J. H., M. Perić, 1996:** *Computational methods for fluid dynamics*. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 356 S.
- Fröhlich, J., 2006:** *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. — B. G. Teubner Verlag.
- Gao, S., Z. Yang, P. R. Voke, 1994:** Balance equations in finite-volume large-eddy simulations, Departmental Working Paper ME-FD/94.27, Department of Mechanical Engineering, Surrey University.
- Garrat, J. R., 1992:** *The atmospheric boundary layer*. — Cambridge University Press, 316 S.
- GEWEX Cloud System Science Team, 1993:** The GEWEX cloud system study (GCSS). — *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **74**, 387–399.
- Ghosal, S., 1996:** An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence. — *J. Comput. Phys.*, **125**, 187–206.
- Glendening, J. W., T. Haack, 2001:** Influence of advection differencing error upon large-eddy simulation accuracy. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **98**, 127–153.
- Golaz, J.-C., V. E. Larson, W. R. Cotton, 2002:** A PDF-based model for boundary layer clouds. Part II: Model results. — *J. Atmos. Sci.*, **59**, 3552–3571.
- Golaz, J.-C., S. Wang, J. D. Doyle, J. M. Schmidt, 2005:** COAMPS-LES: Model evaluation and analysis of second- and third order moment vertical velocity budgets. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **116**, 487–517.
- Grant, A. L. M., 2006:** The cumulus-capped boundary layer. I: Modelling transports in the cloud layer. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **132**, 1385–1403.

- Grant, A. L. M., A. P. Lock, 2004:** The turbulent kinetic energy budget for shallow cumulus convection. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **130**, 401–422.
- Gropp, W., E. Lusk, A. Skjellum, 1999:** *Using MPI. Portable parallel programming with the Message-Passing Interface.* — MIT Press Cambridge Mass., zweite Aufl., 371 S.
- Groth, J., 1991:** Description of the pressure effects in the Reynolds stress transport equations. — *Phy. Fluids*, **A3 (9)**, 2276–2277.
- Gryschka, M., 2010:** *Untersuchungen zur Entwicklung von Rollenkonvektion in Kaltluftausbrüchen mittels Grobstruktursimulation.* — Dissertation, Leibniz Universität Hannover, Institut für Meteorologie und Klimatologie.
- Hanjalić, K., B. Launder, 2011:** *Modelling Turbulence in Engineering and the Environment - Second-Moment Routes to Closures.* — Cambridge University Press, 379 S.
- Hartmann, D. L., M. E. Ockert-Bell, M. L. Michelsen, 1992:** The effect of cloud type on Earth's energy balance: Global analysis. — *J. Climate*, **5**, 1281–1304.
- van Heerwaarden, C. C., J. V. G. de Arellano, 2008:** Relative humidity as an indicator for cloud formation over heterogeneous land surfaces. — *J. Atmos. Sci.*, **65**, 3263–3277.
- Heus, T., 2012:** Persönliche Mitteilung, Max-Planck-Institut für Meteorologie Hamburg.
- Heus, T., C. C. van Heerwaarden, et al., 2010:** Formulation of the Dutch atmospheric large-eddy simulation (DALES) and overview of its applications. — *Geosci. Model Dev.*, **3**, 415–444.
- Holland, J. Z., E. M. Rasmusson, 1973:** Measurements of the atmospheric mass, energy, and momentum budget over a 500-kilometer square of tropical ocean. — *Mon. Wea. Rev.*, **101**, 44–55.
- Horst, T., J. Kleissl, D. H. Lenschow, C. Meneveau, C.-H. Moeng, M. B. Parlange, P. P. Sullivan, J. C. Weil, 2004:** HATS: Field observations to obtain spatially filtered turbulence fields from crosswind arrays of sonic anemometers in the atmospheric surface layer. — *J. Atmos. Sci.*, **61**, 1566–1581.
- Kaimal, J. C., J. C. Wyngaard, D. A. Haugen, O. R. Coté, Y. Izumi, S. J. Caughey, C. J. Readings, 1976:** Turbulence structure in the convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **33**, 2152–2169.
- Kaiser, R., E. Fedorovich, 1998:** Turbulence spectra and dissipation rates in a wind tunnel model of the atmospheric convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **55**, 580–594.
- Khairoutdinov, M. F., D. A. Randall, 2002:** Similarity of deep continental cumulus convection as revealed by a three-dimensional cloud-resolving model. — *J. Atmos. Sci.*, **59**, 2550–2566.
- Khanna, S., 1998:** Comparison of Kansas data with high-resolution large-eddy simulation fields. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **88**, 121–144.

- Kirkpatrick, M. P., A. S. Ackerman, D. E. Stevens, N. N. Mansour, 2006:** On the application of the dynamic smagorinsky model to large-eddy simulations of the cloud-topped atmospheric boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **63**, 526–546.
- Kolmogorov, A. N., 1941:** Die lokale Struktur der Turbulenz in einer inkompressiblen zähen Flüssigkeit bei sehr großen Reynold'schen Zahlen. — In: *Sammelband zur statistischen Theorie der Turbulenz: die wichtigsten sowjetischen Arbeiten zum Turbulenzproblem*, H. Goering, Hsg., Akademie Verlag, Berlin, 1958, S. 71–76.
- Kraus, H., 2008:** *Grundlagen der Grenzschicht-Meteorologie*. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 211 S.
- Kurowski, M. J., S. P. Malinowski, W. W. Grabowski, 2009:** A numerical investigation of entrainment and transport within a stratocumulus-topped boundary layer. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **135**, 77–92.
- Lappen, C.-L., D. R. Randall, 2001:** Toward a unified parameterization of the boundary layer and moist convection. Part I: New type of mass-flux model. — *J. Atmos. Sci.*, **58**, 2021–2036.
- Launder, B. E., 2005:** *RANS modelling of turbulent flows affected by buoyancy or stratification*. — Predictions of Turbulent flows, Cambridge University Press, S. 50–127.
- Launder, B. E., G. J. Reese, W. Rodi, 1975:** Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure. — *J. Fluid Mech.*, **68**, 537–566.
- Lenschow, D. H., 1974:** Model of the height variation of the turbulence kinetic energy budget in the unstable planetary boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **31**, 465–474.
- Lenschow, D. H., 1998:** Observations of clear and cloud-capped convective boundary layers, and techniques for probing them. — In: *Buoyant convection in geophysical flows*, E. J. Plate, E. E. Fedorovich, D. X. Viegas, J. C. Wyngaard, Hsg., Kluwer Academic Publishers, S. 185–206.
- Lenschow, D. H., B. B. Stankov, 1986:** Length scales in the convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **43**, 1198–1209.
- Lenschow, D. H., J. C. Wyngaard, W. T. Pennel, 1980:** Mean-field and second-moment budgets in a baroclinic, convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **37**, 1313–1326.
- Leonard, A., 1974:** Energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flows. — *Adv. Geophys.*, **18A**, 237–248.
- Letzel, M. O., M. Krane, S. Raasch, 2008:** High resolution urban large-eddy simulation studies from street canyon to neighbourhood scale. — *Atmos. Env.*, **42**, 8770–8784.
- Lilly, D. K., 1967:** The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. — In: *Proceedings of the IBM Scientific Computing Symposium Environmental Sciences*, New York, White Planes, S. 195–210.
- Lumley, J. L., 1975:** Pressure-strain correlation. — *Phys. Fluids.*, **18**, 750.

- Lumley, J. L., 1978:** Computational modeling of turbulent flows. — *Adv. Appl. Mech.*, **18**, 123–176.
- Lumley, J. L., H. A. Panofsky, 1964:** *The structure of atmospheric turbulence.* — John Wiley & Sons, New-York, 239 S.
- Mansour, N. N., J. Kim, P. Moin, 1988:** Reynolds-stress and dissipation-rate budgets in a turbulent channel flow. — *J. Fluid Mech.*, **194**, 15–44.
- Maronga, B., A. F. Moene, D. van Dinter, S. Raasch, F. Bosveld, B. Gioli, 2012:** Derivation of structure parameters in the convective boundary layer from large-eddy simulations and implications for the interpretation of scintillometer observations. — *Boundary-Layer Meteorol.*, angenommen.
- Mason, P. J., 1989:** Large-eddy simulation of the convective atmospheric boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **46**, 1492–1516.
- Mason, P. J., 1994:** Large-eddy simulation: A critical review of the technique. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **120**, 1–26.
- Matheou, G., D. Chung, L. Nuijens, B. Stevens, J. Teixeira, 2011:** On the Fidelity of Large-Eddy Simulation of Shallow Precipitating Cumulus Convection. — *Mon. Wea. Rev.*, **139**, 2918–2939.
- Mellor, G. L., T. Yamada, 1974:** A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. — *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1791–1806.
- Miles, N. L., J. C. Wyngaard, M. J. Otte, 2004:** Turbulent pressure statistics in the atmospheric boundary layer from large-eddy simulation. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **113**, 161–185.
- Mironov, D. V., 2001:** Pressure-potential temperatur covariance in convection with rotation. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **127**, 89–110.
- Mironov, D. V., 2009:** Turbulence in the lower troposphere: second-order closure and mass-flux modelling frameworks. — *Lect. Notes Phys.*, **756**, 161–221.
- Mironov, D. V., V. M. Gryanik, C.-H. Moeng, D. J. Olbers, T. H. Warncke, 2000:** Vertical turbulence structure and second-moment budgets in convection with rotation: A large-eddy simulation study. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **126**, 477–515.
- Mironov, D. V., P. P. Sullivan, 2010:** Effect of horizontal surface temperature heterogeneity on turbulent mixing in the stably stratified atmospheric boundary layer. — In: *19th Amer. Meteorol. Soc. Symp. on Boundary Layers and Turbulence*, Keystone, USA, S. 10, paper 6.3.
- Moene, A. F., B. I. Michels, A. A. M. Holtslag, 2006:** Scaling variances of scalars in a convective boundary layer under different entrainment regimes. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **120**, 257–274.
- Moeng, C.-H., 1986:** Large-eddy simulation of a stratus topped boundary layer. Part I: structure und budgets. — *J. Atmos. Sci.*, **43**, 2880–2900.

- Moeng, C.-H., 1998:** Parameterizations of the convective boundary layer in atmospheric models. — In: *Buoyant convection in geophysical flows*, E. J. Plate, E. E. Fedorovich, D. X. Viegas, J. C. Wyngaard, Hsg., Kluwer Academic Publishers, S. 291–311.
- Moeng, C.-H., W. R. Cotton, et al., 1996:** Simulation of a stratocumulus-topped PBL: Intercomparison among different numerical codes. — *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **77**, 261–278.
- Moeng, C.-H., J. C. Wyngaard, 1986:** An analysis of closures for pressure-scalar covariances in the convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **43**, 2499–2513.
- Moeng, C.-H., J. C. Wyngaard, 1988:** Spectral analysis of large-eddy simulations of the convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **45**, 3573–3587.
- Moeng, C.-H., J. C. Wyngaard, 1989:** Evaluation of turbulent transport and dissipation closures in second-order modeling. — *J. Atmos. Sci.*, **46**, 2311–2330.
- Monin, A. S., 1965:** On the symmetry of turbulence in the surface layer of air. — *Izv. Atm. Oceanic Phys.*, **1**, 45.
- Morinishi, Y., T. Lund, O. Vasilyev, P. Moin, 1998:** Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow. — *J. Comput. Phys.*, **143**, 90–124.
- Naot, D., A. Shavit, M. Wolfshtein, 1970:** Interactions between components and the redistribution of Reynolds stress. — *Isr. J. Technol.*, **8**, 259–269.
- Neggers, R. A. J., 2009:** A dual mass flux framework for boundary layer convection. Part II: clouds. — *J. Atmos. Sci.*, **66**, 1489–1506.
- Neggers, R. A. J., B. Stevens, J. D. Neelin, 2007:** Variance scaling in shallow-cumulus-topped mixed layers. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **133**, 1629–1641.
- Nguyen, K. X., T. W. Horst, C. Tong, 2012:** Measurements of the budgets of the subgrid-scale stress and fluxes in a convective atmospheric boundary layer. — *J. Fluid Mech.*, under revision.
- Nicholls, S., M. A. LeMone, 1982:** The simulation of a fair weather marine boundary layer in GATE using a three-dimensional model. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **108**, 167–190.
- Nishiyama, R. T., A. J. Bedard, 1991:** A “Quad-Disc” static pressure probe for measurement in adverse atmospheres: With a comparative review of static pressure probe designs. — *Rev. Sci. Instrum.*, **62**, 2193–2204.
- Patrinos, A. A. N., A. L. Kistler, 1976:** A numerical study of the Chicago lake breeze. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **12**, 92–123.
- Peltier, L. J., J. C. Wyngaard, 1995:** Structure-function parameters in the convective boundary layer from large-eddy simulations. — *J. Atmos. Sci.*, **52**, 3641–3660.
- Piacsek, S. A., G. P. Williams, 1970:** Conservation properties of convection difference schemes. — **6**, 392–405.
- Pielke, R. A., 2002:** *Mesoscale Meteorological Modeling*. — Academic Press, zweite Aufl., 676 S.

- Pino, D., 2011:** Persönliche Mitteilung, Universitat politecnica de Catalunya Barcelona Tech.
- Pino, D., J. V.-G. de Arellano, 2008:** Effects of shear in the convective boundary layer: analysis of the turbulent kinetic energy budget. — *Acta Geophys.*, **56**, 167–193.
- Pope, S. B., 2000:** *Turbulent flows*. — Cambridge University Press, 771 S.
- Raasch, S., D. Etling, 1991:** Numerical simulation of rotating turbulent thermal convection. — *Beitr. Phys. Atmosph.*, **64**, 185–199.
- Raasch, S., D. Etling, 1998:** Modeling deep ocean convection: Large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. — *J. Phys. Oceanogr.*, **28**, 1786–1802.
- Raasch, S., M. Schröter, 2001:** PALM – A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. — *Meteorol. Z.*, **10**, 363–372.
- Ramachandran, S., J. C. Wyngaard, 2011:** Subfilter-scale modelling using transport equations: large-eddy simulation of the moderately convective atmospheric boundary layer. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **139**, 1–35.
- Ramanathan, V., R. D. Cess, E. F. Harrison, P. Minnis, B. Barkstrom, E. Ahmad, D. Hartmann, 1989:** Cloud-radiative forcing and climate: Results from the earth radiation budget experiment. — *Science*, **243**, 57–63.
- Randall, D. A., J. A. Coakley, C. W. Fairall, R. A. Kropfli, D. H. Lenschow, 1984:** Outlook for research on subtropical marine stratiform clouds. — *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **65**, 12901301.
- Rauber, R. M., H. T. Ochs, et al., 2007:** Rain in shallow cumulus over the ocean: The RICO campaign. — *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **88**, 1912–1928.
- Reynolds, O., 1895:** On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. — *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, **186**, 123–164.
- Riechelmann, T., Y. Noh, S. Raasch, 2012:** A new method for large-eddy simulations of clouds with Lagrangian droplets including the effects of turbulent collision. — *New J. Phys.*, **14**, 065008.
- Ristorcelli, J. R., J. L. Lumley, R. Abid, 1995:** A rapid-pressure covariance representation consistent with the Taylor-Proudman theorem materially frame indifferent in the two-dimensional limit. — *J. Fluid Me*, **292**, 111–152.
- Roache, P. J., 1985:** *Computational fluid dynamics*, Bd. 6. — 446 S.
- de Roode, S. R., C. S. Bretherton, 2003:** Mass-flux budgets of shallow cumulus clouds. — *J. Atmos. Sci.*, **60**, 137–151.
- Rotta, J. C., 1951:** Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz. 1. — *Zs. Phys.*, **129**, 547–572.
- Sagaut, P., 2001:** *Large Eddy Simulation for incompressible flows*. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 319 S.

- Schmidt, H., U. Schumann, 1989:** Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. — *J. Fluid Mech.*, **200**, 511–562.
- Schönwiese, C.-D., 2006:** *Praktische Statistik für Meteorologen und Geowissenschaftler*. — Gebrüder Borntraeger Verlag, vierte Aufl., 302 S.
- Schröter, M. ., 2003:** *Untersuchung der Evolution von Konvektionsstrukturen bei Kaltluftausbrüchen mit Hilfe eines parallelisierten Grobstrukturmodells*. — Dissertation, Universität Hannover, Institut für Meteorologie und Klimatologie.
- Schumann, U., 1973:** *Ein Verfahren zur direkten numerischen Simulation turbulenter Strömungen in Platten- und Ringspaltkanälen und über seine Anwendung zur Untersuchung von Turbulenzmodellen*. — Dissertation, Universität Karlsruhe, Fakultät für Maschinenbau, Kernforschungszentrum Karlsruhe KFK 1854.
- Schumann, U., 1975:** Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. — *J. Comput. Phys.*, **18**, 376–404.
- Schumann, U., 1977:** Realizability of Reynolds-stress turbulence models. — *Phys. Fluids*, **20**, 721–725.
- Schumann, U., R. A. Sweet, 1988:** Fast Fourier transforms for direct solution of Poisson's equation with staggered boundary conditions. — *J. Comput. Sci.*, **75**, 123–137.
- Siebesma, A. P., 1998:** Shallow convection. — In: *Buoyant convection in geophysical flows*, E. J. Plate, E. E. Fedorovich, D. X. Viegas, J. C. Wyngaard, Hsg., Kluwer Academic Publishers, S. 441–486.
- Siebesma, A. P., C. S. Bretherton, et al., 2003:** A large eddy simulation intercomparison study of shallow cumulus convection. — *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1201–1219.
- Siebesma, A. P., J. W. M. Cuijpers, 1995:** Evaluation of parametric assumptions for shallow cumulus convection. — *J. Atmos. Sci.*, **52**, 650–666.
- Soares, P. M. M., P. M. A. Miranda, A. P. Siebesma, J. Teixeira, 2004:** An eddy-diffusivity/mass-flux parameterization for dry and shallow cumulus convection. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **130**, 3365–3383.
- Sommeria, G., J. W. Deardorff, 1977:** Subgrid-scale condensation in models of non-precipitating clouds. — *J. Atmos. Sci.*, **34**, 344–355.
- Sorooshian, S., R. Lawford, P. Try, W. Rossow, J. Roads, J. Polcher, G. Sommeria, R. Schiffer, 2005:** Water and energy cycles: Investigating the links. — *WMO Bulletin*, **54(2)**, 58–64.
- Speziale, C. G., 1984:** Modeling the pressure gradient-velocity correlation of turbulence. — *Phy*, **28**, 69–71.
- Steinfeld, G., 2008:** *Die Beurteilung von Turbulenzmess- und Analyseverfahren der Mikrometeorologie durch virtuelle Messungen innerhalb von Grobstruktursimulationen*. — Dissertation, Leibniz Universität Hannover, Institut für Meteorologie und Klimatologie.

- Stensrud, D. J., 2007:** *Parameterization Schemes. Keys to Understanding Numerical Weather Prediction Models.* — Cambridge University Press, 459 S.
- Stevens, B., 2005:** Atmospheric moist convection. — *Annu. Rev. Earth Planet Sci.*, **33**, 605–643.
- Stevens, B., A. S. Ackermann, et al., 2001:** Simulations of trade wind cumuli under a strong inversion. — *J. Atmos. Sci.*, **58**, 1870–1891.
- Stevens, B., D. H. Lenschow, et al., 2003:** Dynamics and chemistry of marine stratocumulus - DYCOMS-II. — *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **84**, 579–593.
- Stevens, B., C.-H. Moeng, et al., 2005:** Evaluation of large-eddy simulations via observations of nocturnal marine stratocumulus. — *Mon. Wea. Rev.*, **133**, 1443–1462.
- Stull, R. B., 1988:** *An Introduction to Boundary Layer Meteorology.* — Kluwer Academic Publishers, 666 S.
- Sühring, M., 2010:** *Entwicklung und Optimierung numerischer Verfahren höherer Ordnung und ihre Implementierung im LES-Modell PALM.* — Diplomarbeit, Leibniz Universität Hannover, Institut für Meteorologie und Klimatologie.
- Sühring, M., 2011:** persönliche Mitteilung, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover.
- Tennekes, H., J. L. Lumley, 1972:** *A first course in turbulence.* — The MIT Press, 300 S.
- Therry, G., P. Lacarrere, 1983:** Improving the eddy kinetic energy model for planetary boundary layer description. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **25**, 63–88.
- Tiedtke, M., W. A. Heckley, J. Slingo, 1988:** Tropical forecasting at ECMWF: The influence of physical parametrization on the mean structure of forecasts and analyses. — *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **114**, 639–664.
- Umlauf, L., H. Burchard, 2005:** Second-order turbulence closure models for geophysical boundary layers. A review of recent work. — *Cont. Shelf Res.*, **25**, 795–827.
- vanZanten, A. C., B. Stevens, et al., 2011:** Controls on precipitation and cloudiness in simulations of trade-wind cumulus as observed during Rico. — *J. Adv. Model. Earth Syst.*, **3**, 20 pp.
- Wang, S., B. Stevens, 2000:** Top-hat representation of turbulence statistics in cloud-topped boundary layers: a large eddy simulation study. — *J. Atmos. Sci.*, **57**, 423–441.
- Wicker, L. J., W. S. Skamarock, 2002:** Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. — *J. Atmos. Sci.*, **130**, 2088–2097.
- Wilczak, J. M., 1984:** Large-scale eddies in the unstably stratified atmospheric surface layer. Part I: Velocity and temperature structure. — *J. Atmos. Sci.*, **41**, 3537–3550.
- Wilczak, J. M., A. J. Bedard, 2004:** A new turbulence microbarometer and its evaluation using the budget of horizontal heat flux. — *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **21**, 1170–1181.

- Wyngaard, J. C., 2010:** *Turbulence in the atmosphere*. — Cambridge University Press, erste Aufl., 393 S.
- Wyngaard, J. C., O. R. Coté, 1971:** The budgets of the turbulent kinetic energy and temperature variance in the atmospheric surface layer. — *J. Atmos. Sci.*, **28**, 190–201.
- Wyngaard, J. C., W. T. Pennel, D. H. Lenschow, M. A. LeMone, 1978:** The temperature-humidity covariance budget in the convective boundary layer. — *J. Atmos. Sci.*, **35**, 47–58.
- Zeman, O., 1981:** Progress in the modelling of planetary boundary layers. — *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **13**, 253–272.
- Zoric, D., V. A. Sandborn, 1972:** Similarity of large Reynolds number boundary layers. — *Boundary-Layer Meteorol.*, **2**, 326–333.

Danksagung

Ich bedanke mich als erstes bei meinem Doktorvater Prof. Dr. Siegfried Raasch, der mein Promotionsvorhaben durch eine sehr gute Betreuung unterstützt hat. Sein fachlicher Rat, seine Hilfe bei konkreten Problemstellungen und seine Bereitschaft zum Austausch waren maßgebliche Bestandteile, die diese Arbeit ermöglichten. Bedanken möchte ich mich auch bei Prof. Dr. Dieter Etling für die Übernahme des Korreferats dieser Dissertation.

Ein besonderer Dank gilt Dr. Dmitrii Mironov vom Deutschen Wetterdienst (DWD), der als fachlicher Ansprechpartner im Rahmen unseres Forschungsprojekts in der *Extramuralen Forschung* des DWD einen großen Beitrag an der Konzeptionierung dieser Arbeit hatte. In vielen fachlichen Diskussionen konnte ich von seinem breiten und tiefgehenden Wissen über Turbulenzmodellierung profitieren, welches er bereitwillig teilte.

Meinen Kollegen am Institut für Meteorologie und Klimatologie und insbesondere der LES-Arbeitsgruppe danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre, das gute Miteinander und die konstruktive Zusammenarbeit. Ich möchte mich vor allem bei Matthias Sühling und Björn Maronga bedanken, die in zahlreichen Diskussionen Anteil an der Klärung zentraler Fragestellungen hatten. Ein weiterer, großer Dank gilt Matthias Sühling für die Durchsicht dieser Arbeit und wertvolle Rückmeldungen. Auch Björn Maronga möchte ich für die Durchsicht eines Teils der Arbeit danken.

Alle Simulationen, die in diese Arbeit einfließen, wurden auf der SGI Altix des *Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen* (HLRN) durchgeführt. Für die kompetente Unterstützung bei der Durchführung der Simulationen danke ich den Mitarbeitern des HLRN und insbesondere Gabriel Gaus.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei meiner Familie für die Unterstützung während meiner gesamten Studienzzeit. Dr. Gerrit Kühn und Judith ter Haseborg danke ich für das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Mein größter Dank gilt meinem Mann Timon Heinze. Er hat mich verständnisvoll und geduldig bei meiner Arbeit unterstützt und mir immer den nötigen Rückhalt und neue Kraft gegeben.

Die Durchführung dieser Arbeit wurde im Rahmen der *Extramuralen Forschung* des Deutschen Wetterdienstes ermöglicht.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Rieke Heinze (geb. ter Haseborg)
Geburtstag: 11.07.1984
Geburtsort: Barßel
Familienstand: Verheiratet

Beruflicher Werdegang

seit 11/2009 Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover
Bearbeitung des vom Deutschen Wetterdienst im Rahmen der Extramuralen Forschung geförderten Projekts *Hochauflösende Grobstruktursimulationen atmosphärischer Grenzschicht-Turbulenz – Ein Beitrag zur Verbesserung von Turbulenzparametrisierungen durch systematische Untersuchungen höherer statistischer Momente und ihrer Bilanzen*

Studium

seit 11/2009 Promotionsstudium der Meteorologie
10/2004–10/2009 Studium der Meteorologie an der Leibniz Universität Hannover
Diplomarbeit zum Thema *Large-Eddy Simulation von Kármánschen Wirbelstraßen in der atmosphärischen Grenzschicht*

Schulbildung

08/1997–06/2004 Albertus Magnus Gymnasium Friesoythe
Abschluss: Abitur
08/1995–06/1997 Orientierungsstufe Barßel
08/1991–06/1995 Grundschule Barßel

Auszeichnung

07/2012 *Outstanding Student Presentation Award* des 20th Symposium on Boundary Layers and Turbulence für den Konferenzbeitrag *Budgets of scalar fluxes for cloudy boundary layers*

Veröffentlichungen

Publikation

Heinze, R., S. Raasch, D. Etling, 2012: The structure of Karman vortex streets in the atmospheric boundary layer derived from large eddy simulation. — *Meteorol. Z.*, **21**, 221-237.

Vorträge

Heinze, R., S. Raasch, D. Mironov, 2012: Budgets of scalar fluxes for cloudy boundary layers. — *20th Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, Boston.

Heinze, R., S. Raasch, D. Mironov, 2011: Budgets of second order moments for cloudy boundary layers derived from LES. — *13th COSMO General Meeting*, Rom.

Heinze, R., S. Raasch, 2011: Atmospheric vortex streets: structure and properties derived from large eddy simulations. — *EGU General Assembly 2011*, Wien.

Heinze, R., S. Raasch, 2010: Kármánsche Wirbelstraßen in der Atmosphäre – Untersuchungen mittels Large Eddy Simulation.— *DACH Meteorologentagung 2010*, Bonn.

Heinze, R., S. Raasch, 2010: Large eddy simulations of atmospheric vortex streets.— *14th Conference on Mountain Meteorology*, Lake Tahoe Vicinity, Kalifornien.