

**BERICHTE AUS DEM
ZENTRUM FÜR MEERES- UND KLIMAFORSCHUNG**

Reihe A: Meteorologie



Nr. 23

KATHARINA HEINKE SCHLÜNZEN

Validierung hochauflösender Regionalmodelle

**Berichte aus dem Zentrum für Meeres- und Klimaforschung
Reihe A: Meteorologie**

Nr. 23

KATHARINA HEINKE SCHLÜNZEN

Validierung hochauflösender Regionalmodelle

korr. Ausgabe 2006

Meteorologisches Institut
Hamburg 1996

Die "**Berichte aus dem Zentrum für Meeres- und Klimaforschung**" erscheinen in 6 Reihen mit folgendem Inhalt:

Reihe A:	Meteorologie
Reihe B:	Ozeanographie
Reihe C:	Geophysik
Reihe D:	Biogeochemie und Meereschemie
Reihe E:	Hydrobiologie und Fischereiwissenschaft
Reihe Z:	Interdisziplinäre Zentrumsberichte

Alle Beiträge sind unredigiert und geben allein die Meinung des Verfassers wieder. Sie sollen in erster Linie dem sich jeweiligen Thema befassenden Personenkreis als Arbeitsunterlagen dienen und sind oft gleichzeitig Berichte für die Institutionen, die die betreffenden Arbeiten gefördert haben.

Exemplare dieser Arbeit können bezogen werden über:

Meteorologisches Institut
Bundesstr. 55
D-20146 Hamburg

Vorgelegt im Rahmen des Habilitationsverfahrens

ISSN 0947-7128
Zentrum für Meeres- und Klimaforschung der Universität Hamburg
Bundesstr. 53 – 20146 Hamburg

ZUSAMMENFASSUNG

Ein Konzept zur Validierung hochauflösender Regionalmodelle wird vorgestellt, das sowohl die Modelleigenschaften und die Modellrealisierung als auch die Ergebnisse ausgewählter Modellanwendungen berücksichtigt. Das Validierungskonzept umfaßt fünf Kriterien: Vollständigkeit, Nachvollziehbarkeit, Realisierungsgüte, Ergebniscgüte und Ergebniskontrolle. Zur Ableitung der Kriterien werden die wesentlichen physikalischen und mathematischen Grundlagen für die Modellierung atmosphärischer Phänomene in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ dargestellt, wobei auch auf häufig verwendete Näherungen und Parametrisierungen subskaliger Prozesse eingegangen wird. Weiterhin werden Modellanwendungen vorgestellt, deren Ergebnisse wesentlich für die Validierung eines Modells sind. Exemplarisch wird das Kriterium "Vollständigkeit" des Validierungskonzeptes auf eine analytische Lösung und sieben hochauflösende Regionalmodelle angewandt. Die Modelleigenschaften der Modelle unterschiedlicher Komplexität lassen sich so vereinfacht gegenüber stellen. Am Beispiel des mesoskaligen Transport- und Strömungsmodells METRAS wird aufgezeigt, wie ein Modell durch Anwendung des gesamten Validierungskonzeptes beurteilt werden kann.

ABSTRACT

A validation concept for high-resolution atmospheric limited-area models is presented. It takes into account model characteristics, model realisation and results from selected case studies. It includes five criteria: completeness, controllability, realisation quality, result quality and result control. To derive these criteria, the physical and mathematical bases for modelling mesoscale- β and mesoscale- γ phenomena are described together with typical approximations and parameterizations. Additionally, model applications are introduced that can be used for the validation of high-resolution limited-area models. The criterion "completeness" of the validation concept is applied to an analytical solution and seven high-resolution limited-area models, thus allowing a simplified compilation of the characteristics of models with different complexity. All five criteria of the validation concept are applied to the mesoscale transport and stream model METRAS, and conclusions concerning its validation are drawn.

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
ZUSAMMENFASSUNG	I
ABSTRACT	I
1 Einleitung.....	1
2 Physikalische und mathematische Grundlagen der Modellierung.....	7
2.1 Grundgleichungen	7
2.2 Mittelung der Gleichungen.....	9
2.3 Approximationen der Gleichungen	11
2.3.1 Grundsätzliche Approximationen	11
2.3.2 Approximationen der linearisierten Zustandsgleichung	13
2.3.3 Approximationen der Kontinuitätsgleichung.....	14
2.3.4 Approximation der dritten Bewegungsgleichung (hydrostatische Approximation).....	16
2.4 Parametrisierung subskaliger Prozesse.....	18
2.4.1 Turbulente Flüsse und Konvektion.....	18
2.4.1.1 Schließungsansatz	19
2.4.1.2 Prandtlische und bodennahe vertikale Flüsse.....	23
2.4.1.3 Vertikale Flüsse in der Planetaren Grenzschicht	27
2.4.1.4 Konvektion	31
2.4.1.5 Horizontale turbulente Flüsse.....	34
2.4.2 Wolkenmikrophysikalische Prozesse	35
2.4.3 Strahlungsflüsse	36
2.4.4 Quellnahe Transporte.....	37
2.4.5 Deposition.....	39
2.4.5.1 Trockene Deposition.....	39
2.4.5.2 Nasse Deposition	41
2.4.5.3 Feuchte Deposition.....	43
2.5 Randwerte	44
2.5.1 Zeitabhängige Randwerte - Nesting.....	44
2.5.2 Seitliche Ränder	46
2.5.3 Oberer Rand.....	46
2.5.4 Unterer Rand.....	47
2.6 Anfangswerte	50
2.7 Koordinatensysteme	53
2.8 Diskretisierung und numerische Verfahren	54

2.9 Filterung	57
3 Grundlegende Anwendungstests	58
3.1 Bestimmung der Anwendungstests und Fehlergrenzen	58
3.2 Plausibilitätsuntersuchungen	61
3.2.1 Winddrehung in der Grenzschicht	61
3.2.2 Unterschiedliche Quellstärken	62
3.3 Vergleich mit analytischen Lösungen	63
3.3.1 Bergüberströmungen	63
3.3.2 Stofftransport bei verschiedenen atmosphärischen Schichtungen	68
3.4 Vergleich mit Modellergebnissen	71
3.4.1 Inlandverlagerung einer Seewindfront.....	72
3.4.2 Seewindzirkulation mit Wolkeneinfluß	75
3.4.3 Konzentration und Deposition.....	76
3.5 Vergleich mit Messungen.....	77
3.5.1 Wangara-Daten.....	80
3.5.2 Flugzeugmessungen - Beispiel für einen dreidimensionalen Datensatz zur Validierung der Thermodynamik.....	81
3.5.3 Ausbreitungsexperimente im Bereich der Sophienhöhe - Beispiel für einen dreidimensionalen Datensatz zur Validierung der Stoffdynamik.....	83
4 Validierungskonzept	85
4.1 Struktur des Validierungskonzeptes	85
4.2 Prüfpunkte des Validierungskonzeptes	89
4.2.1 Vollständigkeit.....	89
4.2.2 Nachvollziehbarkeit.....	92
4.2.3 Realisierungsgüte	93
4.2.4 Ergebnishgüte	95
4.2.5 Ergebniskontrolle	96
5 Anwendung des Validierungskonzeptes	101
5.1 Gegenüberstellung einiger nichthydrostatischer mesoskaliger Modelle in Hinblick auf ihre Modelleigenschaften	101
5.1.1 Bereich "Dynamik"	103
5.1.2 Bereich "Thermodynamik"	104
5.1.3 Bereich "Stoffdynamik".....	106
5.2 Stand der Validierung am Beispiel des Modells METRAS	108
5.2.1 Vollständigkeit des Modells METRAS	109
5.2.2 Nachvollziehbarkeit des Modells METRAS	109
5.2.3 Realisierungsgüte des Modells METRAS.....	111

5.2.4 Ergebnisgüte des Modells METRAS	111
5.2.4.1 Modellanwendungen zur Basisvalidierung der Dynamik	112
5.2.4.2 Modellanwendungen zur Basisvalidierung der Thermodynamik.....	115
5.2.4.3 Modellanwendungen zur Basisvalidierung der Stoffdynamik.....	116
5.2.5 Ergebniskontrolle des Modells METRAS	117
5.2.6 Zusammenfassende Bewertung.....	119
6 Schlußbemerkungen	121
DANKSAGUNG	125
ANHANG A: Ableitung einer prognostischen Gleichung für die potentielle Temperatur	126
ANHANG B: Ableitung einer elliptischen Differentialgleichung für den Druck.....	128
ANHANG C: Ableitung des Gültigkeitsbereiches der hydrostatischen Approximation.....	129
ANHANG D: Physikalisch, numerisch und durch Filter bedingte Horizontaldiffusion.....	132
ANHANG E: Abhängigkeit der entstehenden atmosphärischen Phänomene von den Anfangswerten	135
ANHANG F: Physikalische Modelle und charakteristische Kennzahlen	137
ANHANG G: Vergleichszahlen	139
ANHANG H: Tabellarische Darstellung der Prüfpunkte des Validierungskriteriums "Vollständigkeit" für eine analytische Lösung und verschiedene nichthydrostatische mesoskalige Modelle.....	141
ANHANG I: Das mesoskalige Transport- und Strömungsmodell METRAS	146
LISTE DER ABBILDUNGEN.....	153
LISTE DER TABELLEN	155
SYMBOLVERZEICHNIS	157
LITERATURVERZEICHNIS	163

1 Einleitung

Die Modellierung atmosphärischer Phänomene hat in den letzten Jahrzehnten große Fortschritte gemacht. Inzwischen sind Modelle unterschiedlichster Komplexität für die Simulation von Phänomenen verschiedenster Größenordnung verfügbar. Abbildung 1-1 zeigt eine Einteilung typischer atmosphärischer Phänomene nach ihrer charakteristischen Zeitdauer T_c und Horizontalausdehnung L_x . Unterschieden wird zwischen dem großskaligen (makroskaligen), mittleren (mesoskaligen) und kleinskaligen (mikroskaligen) Bereich.

Lange Wellen werden z.B. der Makroskala- α zugeordnet, die alle atmosphärischen Vorgänge mit einer Ausdehnung von mehr als 10.000 km einschließt. Zu ihrer Simulation werden global rechnende Modelle verwendet. Am anderen Ende der Skala liegen kleinräumige turbulente Phänomene, die in die Mikroskala- γ eingeordnet werden. Ihre typische Horizontalausdehnung beträgt weniger als 25 m, die charakteristische Zeitdauer etwa 1 Minute. Die kleinräumige Turbulenz wird nur selten modelliert, meist wird sie parametrisiert. In der Mikroskala liegen auch kleinere konvektive Phänomene, die charakteristische Horizontalausdehnungen bis zu einigen Kilometern und charakteristische Zeitdauern bis zu wenigen Stunden aufweisen. Diese Phänomene werden mit Konvektions- und Wolkenmodellen simuliert.

Als mesoskalig werden atmosphärische Phänomene mit charakteristischen Horizontalausdehnungen zwischen einigen Kilometern und einigen Tausend Kilometern bezeichnet. Die charakteristische Zeitdauer der Phänomene liegt dabei zwischen etwa 1 Stunde und 4 Tagen. Damit werden auch Phänomene der synoptischen Skala der Mesoskala, genau genommen der Mesoskala- α , zugeordnet. Sie werden mit regionalen Wettervorhersage- oder regionalen Klimamodellen simuliert. Phänomene der Mesoskala- β und insbesondere der Mesoskala- γ erfordern komplexe, nichthydrostatische Modelle zu ihrer Berechnung. Modelle, die zur Simulation aller Phänomene geeignet sind, die in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ sowie in den angrenzenden Skalen auftreten, werden hier als hochauflösende Regionalmodelle bezeichnet.

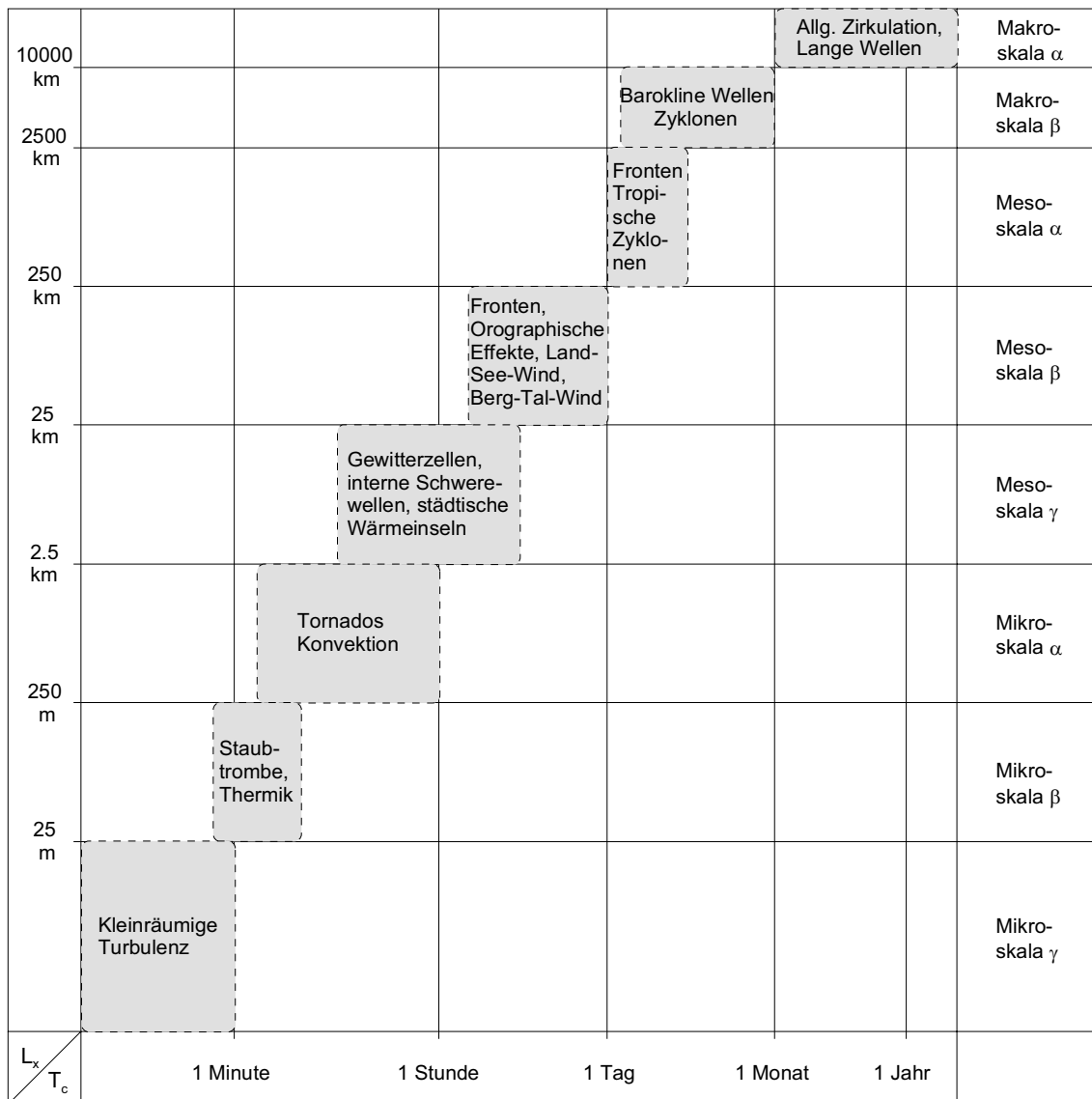


Abbildung 1-1 Einteilung atmosphärischer Phänomene nach charakteristischer Zeitdauer T_c und Horizontalausdehnung L_x (nach Orlandi, 1975; Randerson, 1976).

In Anlehnung an die Einteilung atmosphärischer Phänomene (Abbildung 1-1) sind auch die typischen Modellgruppen charakteristischen Skalen zugeordnet worden (Abbildung 1-2). Die Einteilung erfolgt dabei unter Berücksichtigung der Modellphysik sowie der zeitlichen und räumlichen Auflösung des Modells (vgl. Abschnitt 3.5). Die Weiterentwicklung der Modelle und die Vergrößerung der Rechnerkapazitäten läßt erwarten, daß die in Abbildung 1-2 aufgezeigten zeitlichen und räumlichen Gültigkeitsbereiche der einzelnen Modellgruppen in Zukunft größer werden, wobei auch die Komplexität der einzelnen Modelle zunimmt.

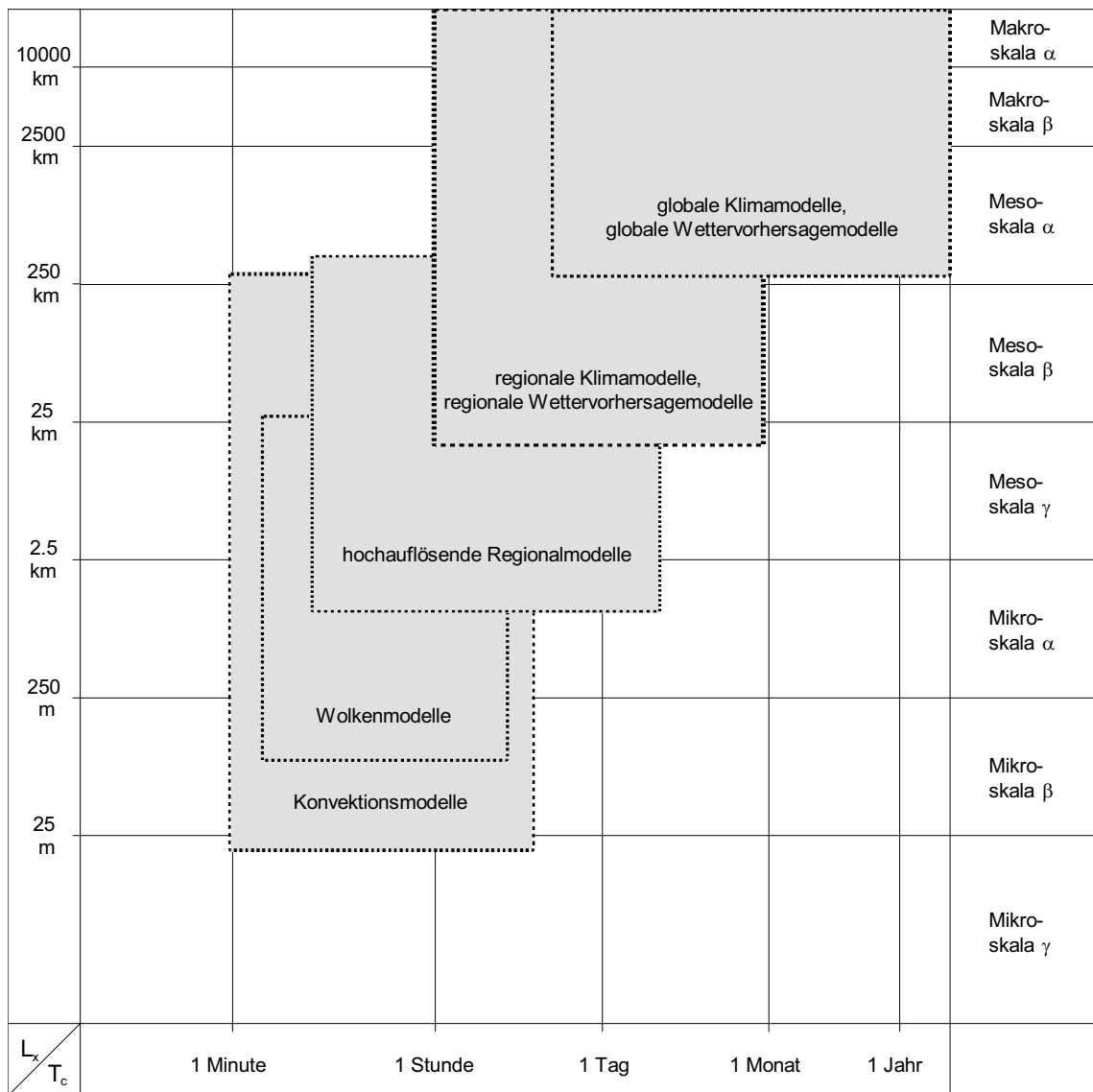


Abbildung 1-2 Einteilung atmosphärischer Modelle in Modellgruppen entsprechend ihrer minimalen und maximalen zeitlichen (T_c) und räumlichen (L_x) Auflösung.

Die Modelle, die zur Simulation verschiedener atmosphärischer Phänomene genutzt werden, unterscheiden sich bezüglich der verwendeten Grundgleichungen nur wenig voneinander (vgl. Abschnitt 2.1). Globale Klimamodelle, regionale Wettervorhersagemodelle und hochauflösende Regionalmodelle enthalten Vorhersagegleichungen für die wichtigsten meteorologischen Größen (Wind, Temperatur, Feuchte, Flüssigwasser), Parametrisierungen der wesentlichen, vom Modell nicht skalig zu berechnenden Prozesse (Turbulenz, Wolkenmikrophysik, Strahlung) und Vorhersagegleichungen für Bodentemperatur und -feuchte. Große Unterschiede bestehen zwischen den Modellgruppen bezüglich der genutzten Näherungen und der Art der Parametrisierungen (Abschnitte 2.3, 2.4) sowie in Hinblick auf die verwendeten Lösungsverfahren (Abschnitt 2.8) und die Rand- und Anfangswerte (Abschnitte 2.5, 2.6).

Die Modelle unterscheiden sich auch bezüglich der Art und dem Grad ihrer Validierung. Bevor auf die Unterschiede näher eingegangen wird, sollen zunächst der Begriff "Validierung" und das in diesem Zusammenhang häufig verwendete Wort "Verifikation" definiert werden. Die nachfolgend aufgeführten Definitionen sind dabei nicht neu, sondern fassen Überlegungen anderer Autoren (Popper, 1982; VDI-GIS, 1993; Oreskes et al., 1994) und die Angaben in Nachschlagewerken (Wissensch. Rat d. Dudenredaktion, 1990, 1991; Brockhaus, 1985) zusammen.

*Unter **Validierung** wird die Erklärung der Gültigkeit eines Modells verstanden. Ein Modell ist für eine bestimmte Skala validiert, wenn es die Kriterien eines für die Skala aufgestellten (und wissenschaftlich / gesellschaftlich anerkannten) Validierungskonzeptes erfüllt. Gibt es mindestens ein Phänomen in der betrachteten Skala, das mit dem Modell nicht im Rahmen zugelassener Abweichungen simuliert werden kann, so kann das Modell für die Skala nicht mehr als validiert gelten (Falsifikation).*

*Unter **Verifikation** wird der Beweis der Richtigkeit eines Modells verstanden. Ein Modell ist für eine bestimmte Skala verifiziert, wenn bewiesen wurde, daß damit bei beliebigen Anfangswerten alle in der Skala entstehenden Phänomene richtig simuliert werden können.*

Zur Verifikation eines Modells müßte also bewiesen werden, daß alle in einer bestimmten Skala entstehenden Phänomene richtig simuliert werden können. Diese Anforderung könnte nur dadurch erfüllt werden, daß mit einem Modell sämtliche in der Skala entstehenden Phänomene nachgerechnet werden und die Ergebnisse jeweils mit Messungen verglichen werden. Neben den bei derartigen Vergleichen entstehenden Problemen (vgl. Abschnitt 3.5) ist diese Vorgehensweise praktisch nicht durchführbar, da weder alle in der Atmosphäre entstehenden Phänomene noch die dazugehörigen Anfangswerte vollständig bekannt sind (vgl. Oreskes et al., 1994). Die Unmöglichkeit dieser Art von Beweisführung wird dadurch noch deutlicher, daß eigentlich gezeigt werden muß, daß alle sinnvollen Variationen der Eingangsparameter realistische Ergebnisse liefern. Atmosphärische Modelle sind also nicht allgemein verifizierbar, lediglich für einzelne Modellergebnisse können sie z.B. durch Vergleiche mit Messungen verifiziert werden (vgl. Popper, 1982).

Im Gegensatz zur Verifikation ist eine Validierung durchaus möglich, da hierbei nicht die realen Gegebenheiten von einem Modell wiedergegeben werden müssen, sondern die Ergebnisse nur im Rahmen einer Konvention, des Validierungskonzeptes, den realen Gegebenheiten entsprechen müssen. Dieses bedeutet, daß Modellergebnis und Realität nicht vollständig gleich sind, sondern nur im Rahmen zugelassener Abweichungen übereinstimmen. Wie groß diese Abweichungen sein

können, wird subjektiv von den einzelnen Wissenschaftler/innen festgelegt. Die Diskussion über zugelassene Abweichungen und dessen, was im Einzelnen unter Validierung zu verstehen ist, führt letztlich zu einem durch die Konsensfindung objektivierten Validierungskonzept. Dieses ist dann wissenschaftlich anerkannt und kann als Maßstab für die Validierung von Modellen dienen. Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, den im Bereich der Validierung hochauflösender Regionalmodelle stattfindenden Diskussionsprozeß durch das vorgeschlagene Konzept anzuregen.

Für Modellanwendungen zur Simulation von Störfällen sind erste Initiativen zur Qualitätssicherung und Validierung von Modellen bereits vorhanden (z.B. Model Evaluation Group, 1994; Fisher und Rhodes, 1994; Vergison, 1994). Für nicht zur Ausbreitungsrechnung bei Störfällen eingesetzte atmosphärische Modelle beginnen vergleichbare Initiativen erst (z.B. VDI-Arbeitsgruppe zur "Qualitätssicherung bei Modellen in Richtlinien", seit März 1995). Gegenwärtig werden atmosphärische Modelle vor allem durch einzelne Anwendungen validiert, wobei die Modellergebnisse mit analytischen Lösungen, den Ergebnissen anderer Modelle und mit Messungen verglichen werden (z.B. Pielke und Mahrer, 1975; Clark und Gall, 1982; Weber et al., 1982; Groß und Etling, 1984; Schumann et al., 1987; Adrian, 1988; Schlünzen, 1988; Gates et al., 1990, 1992; Volkert und Bishop, 1990; Martens und Maßmeyer, 1991; Mengelkamp, 1991; Schlünzen, 1992; Dudhia, 1993; Hass et al., 1993; Iversen 1993; Maßmeyer et al., 1993; Niemeier und Schlünzen, 1993; Groß, 1994; Finkle, 1994; Eppel et al., 1995). Die Güte der Vorhersage wird dabei manchmal anhand statistischer Maßzahlen festgestellt, häufig wird aber eine qualitative Übereinstimmung als Gütemaß herangezogen. Ob ein Modell bezüglich der durchgeführten Simulation dann als verifiziert betrachtet wird, hängt bei der qualitativen Bewertung noch stärker als bei der quantitativen von den subjektiv gesetzten Maßstäben der Gütebeurteilung ab. Aus diesem Grund werden für die im Rahmen des hier vorgeschlagenen Validierungskonzeptes durchzuführenden Vergleiche maximale Abweichungen vorgegeben.

Der Vergleich mit Messungen ist aufgrund der Meßdichte für Modelle verschiedener Skalen unterschiedlich leicht durchführbar. Während beispielsweise für Wettervorhersagemodelle (Makroskala und Mesoskala- α), die mit einer Horizontalauflösung zwischen einigen 10 km und einigen 100 km arbeiten, relativ leicht ein täglicher, statistisch auswertbarer Vergleich von Modellergebnis und eingetretener Situation erfolgen kann, ist dieses für globale Klimamodelle und für hochauflösende Regionalmodelle (Horizontalauflösung einige 100 Meter bis einige Kilometer) sowie für die noch höher auflösenden Modelle nicht ohne weiteres möglich.

Für Modelle, die für die Vorhersage von Klimaänderungen genutzt werden, müssen langjährige Datenreihen zum Vergleich mit Modellergebnissen zur Verfügung stehen. Auch dann können diese Modelle nur am vergangenen und am gegenwärtigen Klima validiert werden. Für die Vorhersage

des zukünftigen Klimas muß vorausgesetzt werden, daß die im Modell verwendeten Parametrisierungen oder festen Parameter (gegenwärtig z.B. meist der Bewuchs) auch bei verändertem Klima gültig sein werden.

Bei hochauflösenden Regionalmodellen und mikroskaligen Modellen müssen zur Validierung Datensätze vorliegen, deren zeitliche und räumliche Auflösung weit über der routinemäßig betriebener Meßnetze liegt. Die Meßnetze einiger Wetterdienste haben für bestimmte Größen (z.B. Niederschlag) zwar Horizontalaufösungen von einigen 10 km, so daß Phänomene der Mesoskala- β von den Messungen aufgelöst werden. Die vertikalen Strukturen werden aber nur in größeren Skalen von einigen hundert Kilometern erfaßt. Auch die zeitliche Auflösung bietet mit 3 bis 24 Stunden nicht für alle Größen die Möglichkeit, die simulierten Tagesgänge zu verifizieren. Hochauflösende Regionalmodelle können also anhand von Routinemessungen kaum validiert werden. Dazu müssen Ergebnisse hochauflösender Feldexperimente genutzt werden. Da hierfür relativ wenige geeignete Datensätze vorliegen, sind ergänzend zum reinen Ergebnisvergleich weitere Prüfungen der Qualität des Modells und seiner Ergebnisse erforderlich.

Mögliche Kriterien für die Validierung einzelner Teile eines Modells haben verschiedene Autoren zusammengestellt (z.B. Roache, 1982; Pielke, 1984; Williamson et al., 1992), ein umfassendes Konzept ist daraus bisher nicht entwickelt worden. In dieser Arbeit wird nun ein Validierungskonzept vorgeschlagen, das von seiner Struktur her auf beliebige atmosphärische Modelle anwendbar ist. Im Detail wird es für Modelle der Mesoskala- β und Mesoskala- γ ausgeführt, deren Validierung aufgrund fehlender Routinedaten besonders schwierig ist. Das Validierungskonzept ermöglicht eine einheitliche, von verfügbaren Routinedaten unabhängige Vorgehensweise zur Validierung von Modellen.

Das Konzept wird in Kapitel 4 ausführlich erläutert und in Kapitel 5 exemplarisch angewandt. Es baut auf den in Kapitel 3 zusammengefaßten grundlegenden Anwendungstests sowie den in Kapitel 2 beschriebenen physikalischen und mathematischen Grundlagen der Modellierung auf.

2 Physikalische und mathematische Grundlagen der Modellierung

Die Modellierung atmosphärischer Prozesse erfolgt wie die von Prozessen in anderen Medien auf Basis der grundlegenden Erhaltungsprinzipien der Hydro- und Thermodynamik für Impuls, Masse und Energie (vgl. Abschnitt 2.1). Die Charakteristiken der Modelle ergeben sich durch die Näherungen, die in unterschiedlichen Medien verschieden sein können (z.B. Vernachlässigung molekularer Diffusion für Luft (Gase), Inkompressibilitätsbedingung für Wasser (Flüssigkeiten), keine turbulente Diffusion in Böden (Festkörper)). Auch innerhalb eines Mediums (z.B. Luft) können je nach beabsichtigter Nutzung des Modells unterschiedliche Approximationen verwendet werden (Abschnitt 2.3). Durch die Approximationen werden die grundlegenden Gleichungen (Abschnitt 2.1) vereinfacht und Modelle gebildet, die nur für die Simulation bestimmter atmosphärischer Phänomene geeignet sind. Die Eignung wird zusätzlich durch die verwendeten Parametrisierungen festgelegt (Abschnitt 2.4). Durch diese lassen sich Prozesse, die in Modellen nicht direkt berechnet werden können, in ihrer Wirkung auf die simulierten Phänomene berücksichtigen.

2.1 Grundgleichungen

Die in dieser Arbeit benutzten Symbole folgen der in der Meteorologie üblichen Notation; im Einzelnen kann ihre Bedeutung dem SYMBOLVERZEICHNIS entnommen werden.

Aus dem Prinzip der Impulserhaltung können die Bewegungsgleichungen abgeleitet werden (z.B. Dutton, 1976):

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p - 2[\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}] - \nabla \Phi + \mathbf{F} \quad (2-1)$$

Das Prinzip der Massenerhaltung führt auf die Kontinuitätsgleichung (2-2) bzw. die Bilanzgleichung für Stoffe (2-3):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2-2)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \chi = F_{\chi} + Q_{\chi} \quad (2-3)$$

Das Prinzip der Energieerhaltung führt auf den 1. Hauptsatz der Thermodynamik, aus dem die prognostische Gleichung (2-4) für die potentielle Temperatur θ abgeleitet werden kann. Die Herleitung dieser Differentialgleichung, die in atmosphärischen Modellen häufig auch für andere Temperaturen formuliert ist, ist in ANHANG A ausgeführt.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \theta = F_{\theta} + Q_{\theta} \quad (2-4)$$

Neben den aufgeführten prognostischen Gleichungen werden zusätzlich einige diagnostische Gleichungen in Modellen verwendet. Die Zustandsgleichung idealer Gase ergibt sich für ein Gasgemisch feuchter Luft unter Berücksichtigung der spezifischen Feuchte q_1^1 , von Flüssigwasser q_1^2 und Eis q_1^3 zu:

$$p = \rho RT \left(1 + \left(\frac{R_1^1}{R} - 1 \right) q_1^1 - q_1^2 - q_1^3 \right) \quad (2-5)$$

Dabei bezeichnet R die Gaskonstante für trockene Luft und R_1^1 die für Wasserdampf. Die potentielle Temperatur wird entsprechend Gleichung (A-7) berechnet als:

$$\theta = T \left(\frac{p_{\infty}}{p} \right)^{R/c_p} \quad (2-6)$$

Als Bezugsdruck p_{∞} wird 1000 hPa gewählt. Wird die Definitionsgleichung (2-6) auf feuchte Luft bezogen, so wird häufig anstelle der Temperatur T die virtuelle Temperatur

$$T_v := \left(1 + \left(\left(R_1^1 / R \right) - 1 \right) q_1^1 \right) T \quad (2-7)$$

verwendet und Gleichung (2-4) als Vorhersagegleichung für die potentielle virtuelle Temperatur benutzt*. In Modellen, mit denen wolkenphysikalische Prozesse modelliert werden sollen, werden auch die äquivalentpotentielle Temperatur oder die Entropie als Vorhersagegröße verwendet (vgl. Doms und Herbert, 1985). Durch die Wahl der zum Problem passenden Vorhersagegröße lassen sich numerische Probleme vermindern, die bei Phasenumwandlungen durch große Änderungen der potentiellen Temperatur entstehen können. Entsprechend der gewählten Vorhersagegröße müssen die im Modell erforderlichen Temperaturumrechnungen, die übrigen Modellgleichungen sowie der Quell- und Senkenterm Q_{θ} in Gleichung (2-4) konsistent formuliert werden.

* Auch die virtuelle potentielle Temperatur, bei der Gaskonstante und spezifische Wärme der Mischung berücksichtigt werden, wird gelegentlich verwendet.

In den meisten Modellen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ werden die Gleichungen (2-1) bis (2-4) mit der Definitionsgleichung (2-6) für die potentielle (virtuelle) Temperatur benutzt. Die Zustandsgleichung für Luft sollte für eine Mischung idealer Gase unter Berücksichtigung von Wasserdampf, Flüssigwasser und Eis formuliert werden (Gleichung 2-5).

2.2 Mittelung der Gleichungen

Die in der mathematischen Formulierung der Erhaltungssätze auftretenden Zustandsgrößen sind jeweils an einem Punkt des Kontinuums gültig. Bei der Atmosphäre handelt es sich aber um ein sehr turbulentes Medium, in dem die Zustandsgrößen in Raum und Zeit stark variieren. Lediglich für Gebiete von etwa 1 cm Seitenlänge und über Zeitintervalle von etwa 1 s können die punktuell ermittelten Werte als repräsentativ angesehen werden (Pielke, 1984). Würde das Gleichungssystem (2-1) bis (2-6) auf ein typisches mesoskaliges Phänomen von etwa 100 km Horizontal- und 10 km Vertikalausdehnung angewendet, müßte es an etwa 10^{20} Orten gelöst werden. Dieses übersteigt auch die Kapazität der größten zur Zeit vorhandenen Computer. Um eine Lösung trotzdem zu ermöglichen, werden statt punktueller, mittlere Größen betrachtet. Die Gleichungen werden dazu gemittelt, d.h. sie werden über ein Volumen $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ und ein Zeitintervall Δt integriert (z.B. Deardorff, 1973). Eine mittlere Größe ist definiert als:

$$\bar{\Psi} \equiv \frac{1}{\Delta t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} \int_{z-\Delta z/2}^{z+\Delta z/2} \int_{y-\Delta y/2}^{y+\Delta y/2} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} \Psi(\xi, \zeta, \eta, \tau) d\xi d\zeta d\eta d\tau \quad (2-8)$$

Für das gewählte Zeit-Raumintervall $\Delta t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ wird dabei vorausgesetzt, daß für die Fluktuation Ψ' und die mittlere Größe $\bar{\Psi}$ gilt:

$$\overline{\Psi'} = 0 \quad \Rightarrow \quad \overline{\bar{\Psi}} = \overline{\Psi + \Psi'} = \bar{\Psi} \quad (2-9)$$

Das Zeitintervall Δt kann beispielsweise dem Zeitschritt eines Modells entsprechen, das Volumen $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ kann das Gittervolumen sein (vgl. Abschnitte 2.8, 3.5 zur Bedeutung der Mittelwerte). Die Variablen in den Grundgleichungen (Abschnitt 2.1) werden gemäß der Vorschriften (2-8) und (2-9) in einen Mittelwert und eine Fluktuation aufgespalten und die Gleichungen anschließend räumlich und zeitlich integriert. Die Vorhersagegleichungen (2-1) bis (2-4) erhalten für die mittleren Größen dann folgende Form:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{v}} = -\overline{(\mathbf{v}' \cdot \nabla) \mathbf{v}'} - \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \bar{p} - \frac{1}{\bar{\rho}'} \nabla \bar{p}' - 2[\boldsymbol{\Omega} \times \bar{\mathbf{v}}] - \nabla \Phi + \bar{\mathbf{F}} \quad (2-10)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}) + \nabla(\bar{\rho}' \mathbf{v}') = 0 \quad (2-11)$$

$$\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \bar{\chi} = -\overline{\mathbf{v}' \nabla \chi'} + \bar{F}_\chi + \bar{Q}_\chi \quad (2-12)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \bar{\theta} = -\overline{\mathbf{v}' \nabla \theta'} + \bar{F}_\theta + \bar{Q}_\theta \quad (2-13)$$

Die diagnostischen Gleichungen (2-5) und (2-6) ergeben sich zu:

$$\bar{p} = R_m \bar{\rho} \bar{T} + R_m \overline{\rho' T'} \quad (2-14)$$

$$\bar{\theta} \cong \bar{T} \left(\frac{p_\infty}{\bar{p}} \right)^{R/c_p} \quad (2-15)$$

Hierbei bezeichnet R_m die Gaskonstante der Mischung feuchter Luft (Gleichung A-5) und R die Gaskonstante für trockene Luft. Bei der Ableitung von Gleichung (2-15) werden die turbulenten Druckschwankungen vernachlässigt (vgl. Annahme 2, Abschnitt 2.3.1).

In hochauflösenden Regionalmodellen wird meist noch eine weitere Zerlegung der Vorhersagegrößen vorgenommen, die den Skalen atmosphärischer Phänomene entspricht. Druck, Dichte, Temperatur und Feuchte werden in einen Grundzustand (Ψ_0) und in einen mesoskaligen Anteil ($\tilde{\Psi}$) zerlegt:

$$\bar{\Psi} = \Psi_0 + \tilde{\Psi} \quad (2-16)$$

Für diese gilt eine Mittelungsvorschrift, die der für die Fluktuationen ähnelt:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\Delta t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z} \int_t^{t+\Delta t} \int_x^{x+\Delta x} \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} \bar{\Psi}(\xi, \zeta, \eta, \tau) d\xi d\zeta d\eta d\tau \quad (2-17)$$

$$\overline{\Psi_0} = \Psi_0 \quad (2-18)$$

Als Integrationsgebiet $\Delta t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ kann entweder das gesamte Modellgebiet betrachtet werden (Pielke, 1984), oder es wird in Hinblick auf den vorgegebenen Grundzustand festgelegt (vgl. Ab-

schnitt 2.6). Der mesoskalige Anteil $\tilde{\Psi}$ bezieht sich in beiden Fällen auf eine Abweichung vom Grundzustand, er kann aber im Gegensatz zu den gemittelten Fluktuationen gemittelt über das Integrationsgebiet $\int \tilde{\Psi} dx \cdot dy \cdot dz$ Werte $\tilde{\Psi}$ ungleich Null annehmen.

2.3 Approximationen der Gleichungen

In den einzelnen Modellen werden die gemittelten Grundgleichungen unterschiedlich approximiert, wodurch die allgemeine Gültigkeit des Gleichungssystems (2-10) bis (2-15) auf die Modellierung bestimmter atmosphärischer Phänomene eingeschränkt wird. Während einige Näherungen bei der Modellierung der meisten mesoskaligen Phänomene und in allen hochauflösenden Regionalmodellen verwendet werden können (Abschnitt 2.3.1), werden andere auch innerhalb der Gruppe der Regionalmodelle uneinheitlich benutzt (Abschnitte 2.3.2, 2.3.3, 2.3.4). Dadurch ergeben sich verschiedene Anwendungsbereiche der Modelle.

2.3.1 Grundsätzliche Approximationen

Verschiedene Approximationen, die für die Simulation mesoskaliger Phänomene benutzt werden, sind auch sonst in meteorologischen Modellen üblich:

1. Die Divergenzen der molekularen Flüsse (im Term $\bar{\mathbf{F}}$ in Gleichung (2-10), in den Termen $\bar{F}_{\chi,\theta}$ in Gleichungen (2-12), (2-13)) werden gegenüber den Transporten aufgrund der Fluktuationen vernachlässigt. Diese Annahme ist für die Simulation der meisten atmosphärischen Phänomene und speziell für Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ gerechtfertigt. Für die Modellierung von Transportprozessen in der Nähe von Oberflächen (viskose Schicht) muß die Divergenz der molekularen Flüsse allerdings berücksichtigt werden.
2. Schwankungen von Druck und Dichte werden gegenüber ihren zeitlich mittleren Werten vernachlässigt, so daß Schallwellen gefiltert werden*. Diese Näherung ist in atmosphärischen Modellen gerechtfertigt, da eine signifikante Wirkung des Schalls auf die Entwicklung mesoskaliger und makroskaliger Phänomene bisher noch nicht beobachtet worden ist. Durch die Vernachlässigung der Druck- und Dichtefluktuationen sind die Geschwindigkeits- und Druck-

*Die durch Schallwellen hervorgerufenen Druck- und Dichteschwankungen bewirken eine Anpassung der Geschwindigkeits- und Druckfelder analog zu der durch Trägheits- und Schwerewellen hervorgerufenen geostrophischen Adjustierung in der Makroskala.

felder zu jedem Zeitschritt aneinander angepaßt. Soll allerdings die Ausbreitung von Schallwellen simuliert werden, darf die Approximation nicht verwendet werden.

3. Würden in den Modellgleichungen nicht nur die Fluktuationen, sondern alle Abweichungen der Dichte vom Grundzustand vernachlässigt werden, so könnten thermische Unterschiede die Bewegungsvorgänge nicht mehr beeinflussen. Dadurch würden unrealistische Modellergebnisse entstehen. Unter der Annahme, daß die Dichtestörungen gering sind, d.h.

$$|\tilde{\rho}/\rho_0| \ll 1 \quad (2-19)$$

werden in hochauflösenden Regionalmodellen Dichteveriationen nur in den Termen der Modellgleichungen berücksichtigt, die zum Auftrieb beitragen. In allen anderen Termen werden sie vernachlässigt (Boussinesq-Approximation; z.B. Dutton und Fichtel, 1969).

4. Wasserdampf und Luft werden als ideale Gase betrachtet. Für atmosphärische Prozesse, bei denen keine extrem hohen Drücke auftreten, ist diese Approximation gerechtfertigt. Sollen beispielsweise Prozesse in einem Flüssiggastank simuliert werden, müssen reale Gase betrachtet werden.
5. Bei Entstehen von Flüssigwasser und Eis wird angenommen, daß die kondensierte bzw. feste Phase die gleiche Temperatur wie die feuchte Luft aufweisen. Das vorausgesetzte thermodynamische Gleichgewicht entspricht einer augenblicklichen Anpassung der Zustandsvariablen und ist bei Simulation mikroskaliger wolkenphysikalischer Prozesse nicht allgemein gerechtfertigt. Für die Modellierung mesoskaliger und größerskaliger Phänomene ist die Approximation aber zulässig.
6. Die Strahlungsflußdichte der Sonne wird während einer Modellrechnung als zeitlich konstant vorausgesetzt. Diese Approximation ist für die meisten Modellnutzungen und insbesondere in hochauflösenden Regionalmodellen gerechtfertigt. Sollen allerdings Klimaänderungen modelliert werden, muß die zeitliche Änderung berücksichtigt werden.
7. Die Schwerebeschleunigung und die Rotationsgeschwindigkeit der Erde werden als zeitlich und räumlich konstant vorausgesetzt. Diese Approximation ist für die üblichen Anwendungen mesoskaliger Simulationsmodelle ebenfalls erfüllt.
8. Der Coriolisparameter $f = 2\Omega \sin \varphi$ hängt von der geographische Breite φ ab und wird in global rechnenden Modellen entsprechend berücksichtigt. In Modellen, die in kartesischen Koordi-

naten rechnen, kann die Breitenabhängigkeit durch Einführung einer sogenannten β -Ebene näherungsweise berücksichtigt werden (z.B. Dutton, 1976):

$$f = f_0 + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y=0} \cdot y \quad (2-20)$$

Dabei bezeichnet f_0 den Coriolisparameter f in der Bezugsbreite φ_0 , $\beta = \partial f / \partial y$ den Rossbyparameter und y die Nord-Süd-Entfernung von der Bezugsbreite φ_0 . Bei einer Nord-Süd-Ausdehnung des Gebietes von weniger als 1800 km ist in gemäßigten Breiten der Effekt des Rossbyparameters vernachlässigbar. Wippermann (1981) leitet aus einer linearen Analyse ab, daß der Rossbyparameter sogar bis zu einer charakteristischen Horizontalausdehnung der Phänomene von 2500 km vernachlässigt werden kann. Nach diesen Abschätzungen muß der Rossbyparameter in Regionalmodellen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ bei Anwendung auf mittlere Breiten nicht berücksichtigt werden, d.h. der Coriolisparameter wird im Modellgebiet konstant gesetzt. Für eine Modellierung mikroskaliger Phänomene, bei der die Winddrehung mit der Höhe nicht bedeutsam ist, kann die Corioliskraft auch ganz vernachlässigt werden (Modelle für die bodennahe Grenzschicht).

9. Für makroskalige Phänomene kann unter der Voraussetzung kleiner Rossbyzahlen Ro (siehe Tabelle F-1) die geostrophische Approximation verwendet werden:

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_g = \frac{1}{\rho_0 f} \mathbf{k} \times \nabla p \quad (2-21)$$

Nach Wippermann (1981) sollte die charakteristische Horizontalausdehnung der Phänomene L_x dabei mehr als 2500 km betragen. Für mesoskalige und mikroskalige Phänomene ist die geostrophische Approximation nicht gültig.

2.3.2 Approximationen der linearisierten Zustandsgleichung

In den meisten hochauflösenden Regionalmodellen wird für den mesoskaligen Dichteanteil die Boussinesq-Approximation verwendet (Abschnitt 2.3.1, Punkt 3.). Die Dichteabweichung $\tilde{\rho}$ kann aus der linearisierten Zustandsgleichung berechnet werden:

$$\frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} = -\frac{\tilde{\theta}}{\theta_0} + \frac{c_v}{c_p} \frac{\tilde{p}}{p_0} - \left(\frac{R_1^1}{R} - 1 \right) \tilde{q}_1^1 + \tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_1^3 \quad (2-22)$$

Diese Gleichung kann ohne wesentliche Genauigkeitsverluste als linearisierte Zustandsgleichung für ein Luft - Wassergemisch verwendet werden (Doms und Herbert, 1985). Werden Feuchteinflüsse nicht berücksichtigt, so fallen die letzten drei Summanden von Gleichung (2-22) weg. Die Dichteabweichung aufgrund der Druckstörungen kann für flache Konvektion, d.h. charakteristische Höhen der Phänomene von weniger als einem Kilometer, ebenfalls vernachlässigt werden (Dutton und Fichtel, 1969). Die genäherte linearisierte Zustandsgleichung für flache Konvektion lautet:

$$\frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} = -\frac{\tilde{\theta}}{\theta_0} \quad (2-23)$$

Da konvektiv bedingte Prozesse bei instabil geschichteter Atmosphäre in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ häufig entstehen, kann die Näherung (2-23) in hochauflösenden Regionalmodellen nur selten genutzt werden. Meist muß die vollständige linearisierte Gasgleichung (2-22) verwendet werden, um realitätsnahe Vertikalstrukturen zu modellieren.

2.3.3 Approximationen der Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung (2-11) beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Strömungsfeld und zeitlichen und räumlichen Dichteänderungen. Damit die für meteorologische Phänomene nicht relevanten Schallwellen als Lösung aus dem Differentialgleichungssystem eliminiert werden, werden lokale zeitliche Änderungen der Dichte in hochauflösenden Regionalmodellen meist nicht zugelassen, sondern es wird von einer vorgegebenen, räumlich und zeitlich entsprechend Gleichung (2-17) variablen Dichte ρ_0 des Grundzustandes ausgegangen. Unter Berücksichtigung der Boussinesq-Approximation ergibt sich die anelastische Approximation:

$$\nabla \rho_0 \bar{\mathbf{v}} = 0 \quad (2-24)$$

Diese Näherung ist für hochreichende Konvektion und in der gesamten Mikro- und Mesoskala gültig. Auch für Simulationen von Phänomenen der Makroskala- β kann die anelastisch approximierter Form der Kontinuitätsgleichung benutzt werden (Wippermann, 1981).

In hochauflösenden Regionalmodellen wird die Dichte ρ_0 häufig als horizontal homogen angenommen und nur als höhenabhängig betrachtet. Auch mit dieser Näherung kann ein Modell zur Simulation hochreichender Konvektion verwendet werden (Dutton und Fichtel, 1969). Der Gültig-

keitsbereich des Modells ist dagegen deutlich eingeschränkt, wenn ein inkompressibles Medium und die Divergenzfreiheit des Strömungsfeldes vorausgesetzt werden:

$$\nabla \bar{\mathbf{v}} = 0 \quad (2-25)$$

Diese Vereinfachung der realen Atmosphäre beschränkt die Anwendung der Modelle auf flache Konvektion (Dutton und Fichtel, 1969). Wippermann (1981) bzw. Businger (1982) ermitteln aus Größenordnungsabschätzungen bzw. über ein linearisiertes Gleichungssystem den Gültigkeitsbereich der Approximation (2-25) auf Phänomene mit einer charakteristischen Horizontalausdehnung bis zu 12 km bzw. 20 km (Mesoskala- γ). Dabei sollten nur Grenzschichtphänomene betrachtet werden, da sonst die Dichteänderung mit der Höhe 10% des bodennahen Wertes überschreitet und somit größere Fehler im als divergenzfrei berechneten Windfeld zu erwarten sind. Die Näherung der Kontinuitätsgleichung für flache Konvektion ist für höherreichende Phänomene nicht mehr gerechtfertigt.

In Modellen zur Simulation von Phänomenen der Mesoskala- α und der Makroskala kann nicht anelastisch approximiert, sondern es sollte mit der vollständigen Kontinuitätsgleichung gerechnet werden. Die Gleichungen werden dabei häufig in einem Koordinatensystem gelöst, das am Druck p orientiert ist. Aufgrund der Transformation der Gleichung (2-2) in dieses Koordinatensystem, bei der die hydrostatische Approximation (Abschnitt 2.3.4) vorausgesetzt wird, verändert sich die äußere Form der Kontinuitätsgleichung, nicht aber ihr physikalischer Gehalt. Die mit dem Druck p als Vertikalkoordinate realisierten Modelle setzen die Divergenzfreiheit im p -System voraus:

$$\frac{\partial \omega}{\partial p} + \nabla_p \mathbf{v}_h = 0 \quad (2-26)$$

Die Schallfilterung erfolgt in Modellen mit vollständiger Kontinuitätsgleichung z.B. über die hydrostatische Approximation und geeignete Randbedingungen. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die Terme des Differentialgleichungssystems, die Schallwellen enthalten, implizit oder mit kleinerem Zeitschritt zu lösen (Tapp und White, 1976; Carpenter, 1979).

2.3.4 Approximation der dritten Bewegungsgleichung (hydrostatische Approximation)

Wird die Auftriebsbeschleunigung augenblicklich durch die vertikale Druckgradientkraft ausgeglichen, so kann die dritte Bewegungsgleichung in ihrer hydrostatisch approximierten Näherung verwendet werden. Diese lautet in kartesischen Koordinaten:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} = -g\bar{\rho} \quad (2-27)$$

In Hinblick auf die hydrostatische Approximation werden atmosphärische Modelle in zwei bezüglich ihres Aufbaues verschiedene Gruppen, die hydrostatischen und die nichthydrostatischen Modelle eingeteilt. In einem hydrostatischen Modell wird der Druck aus der approximierten dritten Bewegungsgleichung (2-27) berechnet. Der Vertikalwind wird aus der anelastischen Approximation (2-24), aus der Divergenzfreiheit (2-25) oder aus der Kontinuitätsgleichung (2-26) ermittelt. In nichthydrostatischen Modellen wird der Vertikalwind mit Hilfe der vollständigen dritten Bewegungsgleichung (2-10) berechnet und für den Druck eine elliptische Differentialgleichung gelöst. Diese wird aus der anelastischen Approximation (2-24) oder der Divergenzfreiheit (2-25) und den Bewegungsgleichungen (2-10) abgeleitet (siehe ANHANG B).

Die numerische Lösung der Differentialgleichung für den nichthydrostatischen Druckanteil kann durch direkte oder iterative numerische Methoden erfolgen. Unabhängig vom gewählten Verfahren benötigen nichthydrostatische Modelle mehr Speicherplatz und meist auch mehr Rechenzeit als hydrostatische Modelle. Auch die im vorigen Abschnitt erwähnte Methode, bei der in einem nichthydrostatischen Modell unterschiedliche Terme mit verschiedenen Zeitschritten gelöst werden, erfordert höhere Rechenzeiten als ein hydrostatisches Modell. Der höhere Rechenzeitverbrauch des schallgefilterten Differentialgleichungssystems ist um so größer, je mehr der atmosphärische Zustand vom hydrostatischen Gleichgewicht abweicht, das heißt, je weniger ein sofortiger Ausgleich zwischen vertikaler Druckgradientkraft und Auftriebsbeschleunigung erfolgt. Dieses ist insbesondere bei kleinräumigen Phänomenen, beispielsweise im Bereich von Wolken oder bei Hindernisum- und -überströmungen der Fall. Bei größeren Gitterweiten sind nichthydrostatische Effekte meist von untergeordneter Bedeutung. Daher benötigen nichthydrostatische Modelle bei Nutzung großer Gitterweiten häufig nicht viel mehr Rechenzeit als hydrostatische Modelle.

Die Bedeutung der nichthydrostatischen Druckgradientkraft für die Modellierung atmosphärischer Prozesse kann anhand der Größenordnung der Terme in der dritten Bewegungsgleichung abgeschätzt werden (ANHANG C). Für das Verhältnis der vertikalen Druckgradientkräfte aufgrund von

nichthydrostatischem (\tilde{p}_{nh}) und hydrostatischem (\tilde{p}_{hy}) Druckanteil ergibt sich eine Abhängigkeit von der internen Froudezahl Fr_d :

$$\frac{|\partial\tilde{p}_{nh}/\partial z|}{|\partial\tilde{p}_{hy}/\partial z|} \approx Fr_d^2 = \frac{W^2}{N^2 L_z^2} \quad (2-28)$$

Dabei bezeichnet N die Brunt-Väisälä-Frequenz, die von der Stabilität der Schichtung abhängt (Tritton, 1977, Seite 192):

$$N = \sqrt{-\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}} \quad (2-29)$$

Häufig wird die Brunt-Väisälä-Frequenz nur genähert berechnet, wobei die Gültigkeit von Gleichung (2-23) vorausgesetzt wird:

$$N = \sqrt{\frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z}} \quad (2-30)$$

Nach Gleichung (2-28) ist die hydrostatische Approximation um so eher gerechtfertigt, je stabiler die atmosphärische Schichtung ist, je geringer der Vertikalwind und je größer die Vertikalausdehnung des Phänomens ist. Die in ANHANG C aufgeführten Skalenabschätzungen zeigen, daß die Gültigkeit der hydrostatischen Approximation vor allem bei Phänomenen in der Mesoskala- γ kritisch ist (siehe auch: Orlanski, 1981; Wippermann, 1981; Schlünzen und Schatzmann, 1984; Bernhard, 1991). Bei den Abschätzungen wird die Stationarität der Strömungsmuster vorausgesetzt, instationäre Prozesse und eine Skalenwechselwirkung werden nicht untersucht. Diese können dazu führen, daß kleinskalige nichthydrostatische Phänomene auch Prozesse größerer charakteristischer Horizontalausdehnung beeinflussen, indem sie Energie an größere Phänomene abgeben (z.B. Konvektion). Die nichtlinearen Prozesse bewirken beispielsweise verminderte Vertikalgeschwindigkeiten im Bereich von Seewindfronten (Martin und Pielke, 1983) oder höhere Verlagerungsgeschwindigkeiten bei atmosphärischen Dichteströmungen (Ulrich, 1991). Die hier aufgeführten Skalenabschätzungen bilden insofern nur Anhaltspunkte bzgl. der Gültigkeit der hydrostatischen Approximation und lassen keine allgemeingültigen Schlußfolgerungen zu. In hochauflösenden Regionalmodellen sollte in Hinblick auf eine realitätsnahe Modellierung aller Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ die vollständige dritte Bewegungsgleichung verwendet werden (nichthydrostatisches Modell).

2.4 Parametrisierung subskaliger Prozesse

Die Approximationen, die in einem Modell genutzt werden, bestimmen wesentlich, welche Phänomene vorhergesagt werden können. Deren mögliche Horizontal- und Vertikalausdehnung hängt dabei auch von der Gitterweite* des Modells ab. Die supraskaligen Phänomene des Grundzustandes, die die vorhergesagten Strukturen intensiv beeinflussen, werden mit mesoskaligen Modellen nicht vorhergesagt. Sie werden als bekannt vorausgesetzt und oftmals horizontal homogen und stationär vorgegeben oder über ein Modell-Nesting in den Randbereichen des Modells der Lösung aufgeprägt (vgl. Abschnitte 2.5.1, 2.6). Die kleinskaligen subskaligen Phänomene, die aufgrund der Gitterweite des Modells nicht direkt berechnet werden können, werden in ihrer Wirkung auf die vorhergesagten Größen mit Hilfe von Parametrisierungen berücksichtigt. Dabei bestehen für jeden subskaligen Prozeß verschiedene Möglichkeiten der Parametrisierung. Die Wahl der Parametrisierung hängt vor allem von der beabsichtigten Anwendung des Modells ab. Diese bestimmt auch, ob ein subskaliger Prozeß überhaupt parametrisiert werden muß.

Viele Parametrisierungen, die in mesoskaligen Modellen verwendet werden, unterscheiden sich in ihrer Struktur wenig von denen, die in größerskaligen Modellen benutzt werden. Sie differieren aber im Detail und die meisten Parametrisierungen hängen direkt (z.B. Wolkenbildung bei 100 % relativer Feuchte in einem hochauflösenden Regionalmodell, bei 80 % relativer Feuchte in einem globalen Modell, das mit großer Gitterweite gerechnet wird) oder indirekt (z.B. Verwendung des Horizontalgradienten einer Größe in der Parametrisierung) von der Gitterweite ab. Dadurch wird die von der Auflösung des Modells abhängige physikalische Struktur der subskaligen Prozesse teilweise berücksichtigt.

In den folgenden Abschnitten werden Parametrisierungen verschiedener subskaliger Prozesse vorgestellt. Die Parametrisierung der turbulenten Flüsse nimmt dabei den breitesten Raum ein, da sie in allen Anwendungen eines hochauflösenden Regionalmodells erforderlich ist.

2.4.1 Turbulente Flüsse und Konvektion

Aufgrund der Integration der Gleichungen über Zeitintervalle und Gittervolumina entstehen in den Modellgleichungen Transportterme der Fluktuationen (z.B. $\overline{(\mathbf{v}' \cdot \nabla) \mathbf{v}'}$). Diese lassen sich mit Hilfe

* In spektralen Modellen entspricht dies der maximalen Wellenzahl, durch die die horizontale Auflösung in Abhängigkeit von der Gebietsgröße des Modells bestimmt wird. Das Wort Gitterweite wird im folgenden Text synonym verwendet.

der Kontinuitätsgleichung (2-11) unter Vernachlässigung der Dichteschwankungen (Annahme 2, Abschnitt 2.3.1) in Flußform schreiben:

$$-\overline{u_i' \frac{\partial u_j'}{\partial x_i}} = -\overline{u_i' \frac{\partial u_j'}{\partial x_i}} - \underbrace{\overline{u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_i}}}_{=0} = \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_i' u_j'} \quad (2-31)$$

Für die Gleichung gilt, wie für die nachfolgenden Gleichungen, die Einstein'sche Summenkonvention.

2.4.1.1 Schließungsansatz

Zur Berechnung der Korrelationsprodukte der Fluktuationen (Flüsse) müssen zusätzliche Gleichungen aufgestellt werden, da die Zahl der Unbekannten des Differentialgleichungssystems die Zahl der Gleichungen übersteigt. Für die Flüsse können entweder prognostische Gleichungen abgeleitet werden (Schließung 2. Ordnung)* oder sie werden mit plausiblen Annahmen aus skaligen Größen berechnet (Schließung 1. Ordnung). Meistens werden in mesoskaligen und größerskaligen Modellen Schließungen 1. Ordnung benutzt, wobei Ansätze für den Diffusionskoeffizienten bis zum Level 2.5 nach der Klassifikation von Mellor und Yamada (1974) verwendet werden.

Die subskaligen Flüsse werden als turbulente Flüsse betrachtet und wie diese analog zu den molekularen Flüssen über einen Gradientansatz parametrisiert (Schließung 1. Ordnung). Dieser lautet in kartesischen Koordinaten für die Impulsflüsse (z.B. Deardorff, 1973):

$$\overline{u_i' u_j'} = -K_{mij} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{E} \quad (2-32)$$

δ_{ij} bezeichnet das Kroneckerdelta, $\bar{E} = 1/2 \overline{u_i' u_i'}$ die mittlere turbulente kinetische Energie.

Wird nur der erste Summand in Gleichung (2-32) berücksichtigt (z.B. Pielke, 1984, Seite 63), geht die Symmetrie des Schubspannungstensors verloren, die z.B. nach Tennekes und Lumley (1972, Seite 32) oder Tritton (1977, Seite 60) gegeben sein muß. Wäre der Schubspannungstensor asymmetrisch, so bedeutete dieses mathematisch, daß z.B. das Korrelationsprodukt $\overline{u' w'} \neq \overline{w' u'}$ wäre und damit das Kommutativgesetz bei der Definition eines Korrelationsproduktes nicht erfüllt wäre. Eine Parametrisierung mit asymmetrischen Schubspannungstensor sollte daher nicht verwendet werden.

* Auch in diesen Gleichungen sind wieder neue Unbekannte enthalten, deren Berechnung nur über neue prognostische Gleichungen erfolgen kann. Dieses führt auf das sogenannte Schließungsproblem.

Gelegentlich werden die Impulsflüsse ohne den \bar{E} -Term in Gleichung (2-32) parametrisiert, wodurch die Normalspannungen $\overline{u'_i u'_i}$ zu geringe Werte annehmen. Da ihr Einfluß auf das mittlere Strömungsfeld aber im Verhältnis zu den in gleiche Richtung wirkenden Druckgradientkräften und zur Advektion meist gering ist, beeinträchtigt diese Ungenauigkeit die Modellergebnisse im allgemeinen nicht.

Aus der Symmetrie des Schubspannungstensors folgt bei Verwendung von Gleichung (2-32) zur Parametrisierung der Flüsse zwingend die Symmetrie des Tensors der Diffusionskoeffizienten, d.h.: $K_{mij} = K_{mji}$. In atmosphärischen Modellen wird dabei häufig die horizontale Symmetrie des Tensors vorausgesetzt und nur zwischen horizontalen (K_{mh}) und vertikalem (K_{mv}) Diffusionskoeffizienten unterschieden, da über die dreidimensionale Struktur des Tensors der Diffusionskoeffizienten noch zu wenig bekannt ist. Eine die Symmetrieeigenschaften erfüllende Zusammenfassung ist (z.B. Schlünzen, 1988):

$$K_{mh} = K_{m12} = K_{m21} = K_{m11} = K_{m22} \quad (2-33)$$

$$K_{mv} = K_{m13} = K_{m31} = K_{m23} = K_{m32} = K_{m33} \quad (2-34)$$

In dieser Arbeit wird, wie in vielen hochauflösenden Regionalmodellen, nur zwischen horizontalen und vertikalen Diffusionskoeffizienten unterschieden.

Die Flüsse skalarer Größen können berechnet werden als (z.B. Hinze, 1959, Seite 25):

$$\overline{\chi' u'_i} = -K_{\chi ij} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_j} \quad (2-35)$$

Über den Tensor $K_{\chi ij}$ ist noch weniger bekannt als über K_{mij} . Daher wird häufig nur die genäherte Form

$$\overline{\chi' u'_i} = -K_{\chi i} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_i} \quad (2-36)$$

von Gleichung (2-35) benutzt, auch wenn $K_{\chi ij}$ in bestimmten Fällen für $i \neq j$ große Werte annehmen kann (Raupach und Legg, 1983) und das Produkt $K_{\chi i} \cdot \partial \bar{\chi} / \partial x_i$ keinen Vektor, sondern einen Tensor zweiter Stufe ergibt. Wird $K_{\chi ij}$ als Skalar festgelegt, vereinfacht sich Gleichung (2-35) zu:

$$\overline{\chi' u'_i} = -K_{\chi} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_i} \quad (2-37)$$

Diese Formulierung ist mathematisch wieder richtig (Hinze, 1959). In Anbetracht dessen kann in einem atmosphärischen Modell entweder Gleichung (2-35) oder Gleichung (2-37) verwendet werden.

Wird Gleichung (2-32) auf einem Gitter diskretisiert, so läßt sich daraus die Abhängigkeit der Flüsse $\overline{u_i' u_j'}$ von den verwendeten Gitterweiten $\Delta x_i, \Delta x_j$ ableiten. Bei nichtlinearen räumlichen Änderungen im Geschwindigkeitsfeld hängen die subskaligen Flüsse $\overline{u_i' u_j'}$ von der Gitterweite $\Delta x_i, \Delta x_j$ ab, falls die Diffusionskoeffizienten die Änderungen nicht kompensieren. Nähme die Geschwindigkeit dagegen linear in alle Raumrichtungen zu, ergäben sich konstante Geschwindigkeitsgradienten. Wären in einem derartigen Fall die Diffusionskoeffizienten K_{mij} unabhängig von der Gitterweite, so wären auch die berechneten subskaligen Flüsse von der Gitterweite unabhängig.

Wie die Abhängigkeit der subskaligen Flüsse von der Gitterweite allgemein lauten müßte, ist bisher kaum untersucht. Die Normalspannungen $\overline{u_i' u_i'}$ können zwar als proportional zur subskaligen turbulenten kinetischen Energie \overline{E} berechnet werden ($\overline{E} = 1/2 \overline{u_i' u_i'}$), doch ist das Spektrum von \overline{E} je nach entstehenden atmosphärischen Phänomenen unterschiedlich. Damit hilft der Zusammenhang zwischen Normalspannungen und turbulenter kinetischer Energie nur in einigen Skalen bei der Entwicklung einer Parametrisierung. Wird die subskalige turbulente kinetische Energie \overline{E} im Modell berechnet (vgl. Parametrisierungen in Abschnitt 2.4.1.3), so kann der Zusammenhang zwischen den Normalspannungen und \overline{E} zur Festlegung der Normalspannungen genutzt werden, Rückschlüsse auf andere subskalige Flüsse sind aber nicht ohne weitere Annahmen möglich.

Bei Wirbeln mittlerer Größenordnung (Zeitskala 10 Minuten bis ein Tag, horizontale Längenskala 5 km bis 150 km) besteht manchmal eine Lücke im Energiespektrum, so daß sich für Gitterweiten zwischen einigen Kilometern und einigen zehn Kilometern die gleichen subskaligen Flüsse ergeben müssen. Bei größeren und kleineren Skalen ist die Wirbelenergie immer skalenabhängig, dieses gilt auch für die subskaligen turbulenten Flüsse. Ist die Lücke im Spektrum schmaler oder existiert sie nicht, wie dies Messungen in größerer Höhe gezeigt haben (Fiedler und Panofsky, 1970; Vinnichenko, 1970), so muß in diesem häufigeren Fall die Parametrisierung in allen Skalen von der Gitterweite abhängen. Dabei müßten die Verfahren die Wirkung der jeweils entstehenden subskaligen Phänomene berücksichtigen.

Bisher gibt es, wie gesagt, in atmosphärischen Modellen keine, auf beliebige Skalen anwendbare Parametrisierung für subskalige turbulente Prozesse. Statt dessen werden für einzelne Spektralbereiche jeweils verschiedene Parametrisierungen verwendet. Diese parametrisieren jeweils die Wirkung der in der betrachteten Skala entstehenden Phänomene auf die vorhergesagten mittleren

Größen. In mesoskaligen Modellen werden vor allem Parametrisierungen für subskalige turbulente und für konvektive Prozesse verwendet. Letzteres geschieht vor allem in Modellen, mit denen auch Phänomene der Mesoskala- α vorhergesagt werden. In diesen werden meist Gitterweiten von einigen zehn Kilometern verwendet und wird beispielsweise auch der Einfluß von Schwerewellen auf die Vertikaldurchmischung parametrisiert (z.B. McGregor et al., 1993). Andere subskalige Phänomene (z.B. Berg-Talwind-Systeme) werden in Mesoskala- α -Modellen allerdings so wenig wie in noch größerskaligen Modellen parametrisiert.

Bei Gitterweiten von weniger als einigen Kilometern wird die Konvektion häufig nicht parametrisiert, obwohl kleinere, konvektiv bedingte Strukturen von den Modellen häufig nicht aufgelöst werden können. Dieses wird aus vielen Untersuchungen konvektiver Strukturen deutlich (z.B. Raasch, 1990). Bei Gitterweiten von nur einigen zehn Metern wirkt die Abnahme der subskaligen Energieflußvermindernd, dieses muß ebenfalls im Ansatz für den Diffusionskoeffizienten berücksichtigt werden. Für das oben angeführte Beispiel (lineare Zunahme der Windgeschwindigkeit in alle Raumrichtungen) müßte der Diffusionskoeffizient dann bei abnehmender horizontaler Gitterweite abnehmen. Entsprechend wird beispielsweise bei direkten Turbulenzmodellierungen (large-eddy Simulationen) die Mischungsweglänge l (vgl. Gleichung 2-57) durch die Gitterweite begrenzt (z.B. Schumann, 1990).

Die hier angedeuteten Abhängigkeiten der subskaligen turbulenten Flüsse von der Gitterweite des Modells werden in regionalen aber auch in größerskaligen Modellen kaum berücksichtigt. Die Parametrisierungen für turbulente und konvektive Prozesse werden oft unabhängig von der jeweiligen Gitterweite des Modells verwendet und es wird davon ausgegangen, daß andere Gitterweiten keine grundsätzlich andere Struktur der Parametrisierungen erfordern. Entsprechend der Grenzschichttheorie werden in hochauflösenden Regionalmodellen, die die Vertikalstruktur aufgelöst simulieren, bei Berechnung der subskaligen turbulenten Flüsse drei Bereiche unterschieden: die Prandtlschicht, in der die Ähnlichkeitsannahmen gelten (Abschnitt 2.4.1.2); die darüber befindliche Grenzschicht, in der eine Winddrehung mit der Höhe erfolgt und mehrere Inversionen auftreten können (Abschnitt 2.4.1.3); die freie Atmosphäre, in der die subskaligen turbulenten Flüsse meist klein sind. Im Bereich von Wolken werden keine zusätzlichen Parametrisierungen verwendet, sondern die gleichen Ansätze wie in der Grenzschicht genutzt. Konvektive Prozesse werden davon unabhängig parametrisiert (Abschnitt 2.4.1.4).

Die Parameterisierungen für die subskaligen turbulenten Transporte müssen so festgelegt werden, daß die Flüsse im Übergangsbereich zwischen Prandtlschicht und darüber befindlicher Grenzschicht stetig sind. Werden in einer der beiden Schichten für verschiedene Schichtungen unterschiedliche Parametrisierungen verwendet, so müssen auch diese bezüglich der Schichtung stetig sein. Dieses ist nur dann gegeben, wenn die Parametrisierungen aufeinander abgestimmt werden

(z.B. Louis, 1979; Delage, 1988; Delage und Girard, 1992; Lüpkes und Schlünzen, 1995). Dabei wird im allgemeinen das Konzept verfolgt, die Parametrisierungen in der Grenzschicht an die in der Prandtl-schicht anzupassen. Auf entsprechende Möglichkeiten wird in den Abschnitten 2.4.1.3 und 2.4.1.4 hingewiesen.

2.4.1.2 Prandtl-schicht und bodennahe vertikale Flüsse

Die Parametrisierung der subskaligen turbulenten Flüsse erfolgt in der Prandtl-schicht entsprechend den Ähnlichkeitsgesetzen (Monin und Obukhov, 1954). Die bodennahen vertikalen Flüsse können in Abhängigkeit von der Schubspannungsgeschwindigkeit u_* bzw. der Skalengrößen χ_* für Temperatur (θ_*) und Feuchte (q_*) berechnet werden:

$$\overline{u'w'} = -u_*^2 \cdot (\bar{u}/U) \quad (2-38)$$

$$\overline{v'w'} = -u_*^2 \cdot (\bar{v}/U) \quad (2-39)$$

$$\overline{\chi'w'} = -u_* \chi_* \quad (2-40)$$

Durch \bar{u}/U bzw. \bar{v}/U wird die mittlere Windrichtung in der Prandtl-schicht berücksichtigt. Für die Berechnung der Flüsse wird Stationarität, Höhenkonstanz der Flüsse und horizontale Homogenität von Wind-, Temperatur- und Feuchtefeld vorausgesetzt (Tennekes, 1982). Die Größen u_* und χ_* ergeben sich zu:

$$u_* = \kappa U(z) \left\{ \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right\}^{-1} \quad (2-41)$$

$$\chi_* = \kappa (\chi(z) - \chi(z_{0\chi})) \alpha_\chi^{-1} \left\{ \ln \left(\frac{z}{z_{0\chi}} \right) - \psi_\chi \left(\frac{z}{L} \right) \right\}^{-1} \quad (2-42)$$

Die Integrationskonstante z_0 (Rauigkeitslänge) wird in atmosphärischen Modellen vorgegeben. Typische Werte dafür, in denen auch der Einfluß der Verteilung der Rauigkeitselemente auf die mittlere Rauigkeitslänge z_0 berücksichtigt ist, sind bei Wieringa (1993) zu finden. Für die Höhe z wird in hochauflösenden Regionalmodellen entweder die Höhe des ersten Gitterpunktes oder die Höhe verwendet, für die der Betrag des Windes (U) bezogen auf das logarithmische Windprofil repräsentativ ist (z.B. Claußen, 1991a; Schlünzen et al., 1994).

Die Monin-Obukhov-Länge L wird berechnet als:

$$L = -\frac{T u_*^3 c_p \rho}{g \kappa (Q_L + Q_s)} \cong \frac{\bar{\theta} u_*^2}{g \kappa \theta_*} \quad (2-43)$$

In dieser Gleichung wird für θ bzw. θ_* die potentielle oder die potentielle virtuelle Temperatur (Gleichung (2-6)) verwendet.

Die Stabilitätsfunktionen ψ_m und ψ_χ lassen sich für instabile Schichtung ($z/L < 0$) berechnen als (vgl. Paulson, 1970; Etling, 1987):

$$\psi_m = 2 \ln\left(\frac{1 + \phi_m^{-1}}{2}\right) + \ln\left(\frac{1 + \phi_m^{-2}}{2}\right) - 2 \arctan(\phi_m^{-1}) + \frac{\pi}{2} \quad (2-44)$$

$$\psi_\chi = 2 \ln\left(\frac{1 + \phi_\chi^{-1}}{2}\right) \quad (2-45)$$

mit den Profilkfunktionen

$$\phi_m = \left(1 - \beta_m \frac{z}{L}\right)^{-1/4} \quad (2-46)$$

$$\phi_\chi = \alpha_\chi \left(1 - \beta_\chi \frac{z}{L}\right)^{-1/2} \quad (2-47)$$

Für stabile und neutrale Schichtung ($z/L \geq 0$) werden die Stabilitätsfunktionen ψ_m , ψ_χ festgelegt nach:

$$\psi_m = \phi_m - 1 \quad (2-48)$$

$$\psi_\chi = (\alpha_\chi - \phi_\chi) \cdot \alpha_\chi^{-1} \quad (2-49)$$

mit den Profilkfunktionen

$$\phi_m = 1 + \gamma_m \frac{z}{L} \quad (2-50)$$

$$\phi_\chi = \alpha_\chi + \gamma_\chi \frac{z}{L} \tag{2-51}$$

Für die Koeffizienten κ , α_χ , β_m , β_χ , γ_m , γ_χ sind aufgrund der Auswertung von Messungen, die über horizontal weitgehend homogenem Gelände durchgeführt wurden, verschiedene Werte festgelegt worden (siehe Tabelle 2-1). Nach Wieringa (1980) sollte κ zu 0.41 ± 0.01 festgelegt werden, während Stull (1994) von $\kappa = 0.40$ ausgeht. In Modellen wird, oft unabhängig vom gewählten Koeffizientensatz, für die von-Kármán-Konstante κ der Wert 0.40 verwendet, wodurch die berechneten Flüsse um bis zu 10% über- oder unterschätzt werden können. Da die Koeffizienten aber auch für einen bestimmten Wert der von-Kármán-Konstante deutliche Unterschiede aufweisen (z.B. Koeffizientensätze für $\kappa = 0.41$ in Tabelle 2-1) und die Skalenabhängigkeit der Parametrisierung meist nicht berücksichtigt wird, erscheint der Fehler in den berechneten Flüssen aufgrund der verwendeten von-Kármán-Konstante von untergeordneter Bedeutung. Besser ist es allerdings, den Koeffizientensatz auf den Wert der von-Kármán-Konstante umzurechnen (vgl. z.B. Wieringa, 1980; Högström, 1988).

κ	α_χ	β_m	β_χ	γ_m	γ_χ	Datenbasis	Literaturangabe
0.35	0.74	15.0	9.0	4.7	4.7	Kansas-Experiment (USA), 1968	Businger et al. (1971)
0.40	1.00	-	-	7.0	7.0	Kitauru (Japan), 1974/75	Kondo et al. (1978)
0.40	1.00	28.0	14.0	-	-	ITCE* (Australien), 1976	Dyer und Bradley (1982)
0.40	0.95	19.3	11.6	4.8†	8.0	Lövster (Schweden), 1986	Högström (1988)
0.40	1.00	19.3	12.0	4.8	7.8		
0.41	1.00	16.0	16.0	-	-	Hay (Australien), 1967‡; Gurley (Australien), 1965	Dyer und Hicks (1970)
0.41	1.00	16.0	16.0	5.0	5.0	Hay (Australien), 1967	Hicks (1976)
0.41	1.00	4.5 §	4.5	5.2	5.2	O'Neill (USA), 1953; Kerang (Australien), 1962/63; Hay (Australien), 1964/65	Webb (1970)
0.41	1.00	16.0	16.0	5.0	5.0	verschiedene Datensätze	Dyer (1974)
0.41	1.00	22.0	13.0	6.9	9.2	Kansas Experiment (USA), 1968	Wieringa (1980)

Tabelle 2-1 Werte für die von-Kármán-Konstante κ und die Koeffizienten der Profildfunktionen.

In der Prandtlschicht lassen sich die in den Gleichungen (2-32), (2-35) benötigten Diffusionskoeffizienten mit $K_{\chi i3} = K_{\chi v}$ berechnen als:

* ITCE: International Turbulence Comparison Experiment in Canargo (NSW, Australien).

† Der Wert 6.0 könnte ebenfalls verwendet werden (Högström, 1988).

‡ Die Messungen von Hay sind Teil des Wangara Datensatzes.

§ Wurde nur für leicht labile Schichtung bestimmt ($z/L > -0.003$).

$$K_{mv}(z) = \frac{\kappa U_* z}{\phi_m\left(\frac{z}{L}\right)} \quad (2-52)$$

$$K_{\chi v}(z) = \frac{\kappa U_* z}{\phi_\chi\left(\frac{z}{L}\right)} \quad (2-53)$$

Die hier aufgeführten Parametrisierungen für die subskaligen Flüsse in der Prandtlschicht gehen von homogenen Bodennutzungen aus, die in der Natur nur in kleineren Gebieten gegeben sind. Bei den in hochauflösenden Regionalmodellen typischerweise verwendeten Gitterweiten von einigen 100 m bis zu einigen Kilometern ist dagegen wie in größerskaligen Modellen sowohl die skalige als auch die subskalige Bodennutzung inhomogen. Gelegentlich ist es möglich, die Gitterweite entsprechend der Inhomogenität der Bodennutzung zu reduzieren (z.B. Kalthoff et al., 1993). Ist die subskalige Bodennutzung homogen, so werden die subskaligen Flüsse wie über homogenem Gelände parametrisiert, auch wenn die skalige Bodennutzung inhomogen ist. Dieses scheint in Anbetracht der in numerischen Modellen üblichen Zeitschrittbegrenzung (vgl. Abschnitt 2.8) und der auch bei Messungen vorausgesetzten Taylor-Hypothese konsistent mit den aus Messungen abgeleiteten Parametrisierungen.

Bei inhomogener subskaliger Bodennutzung sollte die Parametrisierung den Einfluß der inhomogenen Bodennutzung auf die bodennahen Flüsse berücksichtigen. Dieses könnte entweder durch eine flächengewichtete Parametermittlung erfolgen (z.B. Schlünzen, 1990), oder durch Flußmittlung bzw. nach dem sogenannten Blendhöhenverfahren (Claußen, 1991a, 1991b). Danach ergibt sich z.B. für Gleichung (2-41) (vgl. Claußen, 1991b; Herrmann, 1994; von Salzen et al., 1995b):

$$u_* = \kappa U(z) \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{f_{oi}}{(\ln(z/z_{oi}) - \psi_m(z/L_i))^2}} \quad (2-54)$$

Dabei bezeichnet f_{oi} den prozentualen Anteil der i -ten Bodennutzungsklasse und z_{oi} bzw. L_i die zugehörige Rauheitslänge bzw. Monin-Obukhov-Länge.

Inwieweit für Modellrechnungen tatsächlich das vollständige Blendhöhenkonzept verwendet werden muß, wird gegenwärtig noch untersucht (z.B. Jackson, 1995; von Salzen et al., 1995a, b). Eine Mittelung der subskaligen Flüsse ist vor allem dann bedeutsam, wenn große Temperatur- und Feuchteunterschiede innerhalb der betrachteten Gitterzelle zwischen den verschiedenen Bodennutzungen auftreten. In diesem Fall kann z.B. der aus flächengewichteter Bodentemperatur und

Temperatur am ersten Gitterpunkt des Modells berechnete Wärmefluß einen entgegengesetzten Transport bewirken, als er sich richtig aufgrund einer Flußmittelungsmethode ergibt (z.B. Lüpkes et al., 1994). Ähnlich wie bei konvektiven Phänomenen können dann Transporte entgegen dem mittleren Gradienten stattfinden. Sind die Temperatur- und Feuchteigenschaften der subskaligen Bodennutzungen ähnlich, so reicht auch eine Parametermittlung, um die verschiedenen Bewuchseigenschaften näherungsweise zu berücksichtigen.

2.4.1.3 Vertikale Flüsse in der Planetaren Grenzschicht

Während in der Prandtschicht den Ähnlichkeitsgesetzen folgend die Diffusionskoeffizienten bis auf die Stabilitätsfunktionen einheitlich festgelegt werden, werden zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten in der planetaren Grenzschicht in mesoskaligen Modellen unterschiedliche Ansätze verwendet. Sie reichen von reinen Profilansätzen (z.B. O'Brien, 1970), über Erweiterungen der in der Prandtschicht verwendeten Parametrisierungen auf die planetare Grenzschicht (Mischungswegansatz), über die Transilient-Methode (Stull, 1984) bis zu Ansätzen, bei denen prognostische Gleichungen mitgeführt werden (Prandtl-Kolmogorov-Ansatz, E- ϵ -Ansatz). In dieser Arbeit werden beispielhaft einige Ansätze aufgeführt, die in hochauflösenden Regionalmodellen gebräuchlich sind. Meistens werden weder rein lokale Ansätze noch reine Profilansätze verwendet, sondern Ansätze genutzt, die sowohl lokale als auch höhenabhängige Einflüsse auf den Diffusionskoeffizienten berücksichtigen.

Die aufgeführten Ansätze sind dazu geeignet, den vertikalen Diffusionskoeffizienten für Impuls (K_{mv}) zu berechnen. Dieser läßt sich über die Prandtlzahl

$$Pr = \frac{K_{mv}}{K_{\theta v}} \quad (2-55)$$

in den vertikalen Diffusionskoeffizienten für Wärme ($K_{\theta v}$) umrechnen. Die Prandtlzahl Pr wird dabei meist in der gesamten Grenzschicht gleich der Prandtlzahl in der Prandtschicht gesetzt. Da über die Diffusion anderer skalarer Größen noch zu wenig bekannt ist, werden deren Diffusionskoeffizienten denen für Wärme gleichgesetzt.

Mischungswegansatz

Der Mischungswegansatz ist eine Erweiterung des Ansatzes (2-52), der für die Prandtlschicht gilt, auf die gesamte Grenzschicht. Der Diffusionskoeffizient hängt von der Mischungsweglänge l , der Scherung des Windes und von der Stabilität ab:

$$K_{mv} = c_1 l^2 \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} \right| f_1(Ri) \quad (2-56)$$

Dabei wird die Mischungsweglänge l z.B. nach Blackadar (1962) berechnet als:

$$l(z) = \frac{\kappa z}{1 + \frac{\kappa z}{\lambda}} \quad (2-57)$$

Für die Wirbelgröße λ werden dabei unterschiedliche Ansätze benutzt (siehe z.B. Tabelle 4 bei Schlünzen, 1994a). Auch der Einfluß der Schichtung auf den Diffusionskoeffizienten (2-56) wird in unterschiedlicher Weise berücksichtigt, wobei die Schichtung über die Richardson'sche Zahl* charakterisiert wird (z.B. Garratt, 1992):

$$Ri = \frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta / \partial z}{(\partial u / \partial z)^2 + (\partial v / \partial z)^2}$$

Für θ wird wieder die potentielle oder die potentielle virtuelle Temperatur verwendet. Die Parameter c_1 und die Funktion $f_1(Ri)$ lassen sich in Gleichung (2-56) so festlegen, daß für alle Schichtungen ein stetiger Übergang zwischen den in der planetaren Grenzschicht und darunter berechneten Flüssen gewährleistet ist. Dieses Konzept ist z.B. beim Ansatz von Louis (1979) verwirklicht. Häufig werden die freien Parameter aber unabhängig von den verwendeten Parametrisierungen und Profildfunktionen bestimmt, so daß die Flüsse im Übergangsbereich zwischen Prandtlschicht und planetarer Grenzschicht unstetig sein können.

Prandtl-Kolmogorov-Ansatz

Diese Formulierung für den Diffusionskoeffizienten entspricht dem Level 2.5 nach Mellor und Yamada (1974). Außer der diagnostischen Gleichung für den Diffusionskoeffizienten

* Die hier verwendete Form wird auch als Gradient-Richardson'sche Zahl bezeichnet.

$$K_{mv} = c_2 l \sqrt{\bar{E}} \quad (2-58)$$

und der Gleichung (2-57) für die Mischungsweglänge l muß noch eine prognostische Gleichung für die mittlere turbulente kinetische Energie \bar{E} gelöst werden. Diese lautet in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_0 \bar{E}}{\partial t} = & - \underbrace{\rho_0 \bar{u}_i \frac{\partial \bar{E}}{\partial x_i}}_{\text{Advektion durch mittleren Wind}} - \underbrace{\rho_0 \overline{u'_i \frac{\partial \bar{E}}{\partial x_i}}}_{\text{Advektion durch Windfluktuationen}} - \underbrace{\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}}_{\text{Scherproduktion}} \\ & - \underbrace{\overline{u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}}}_{\text{Energietransfer aufgrund von Druckschwankungen}} - \underbrace{\overline{g u'_i \rho' \delta_{i3}}}_{\text{Energieproduktion durch Auftrieb}} - \underbrace{\rho_0 \bar{\varepsilon}}_{\text{Dissipation}} \end{aligned} \quad (2-59)$$

Dabei wird $\bar{\varepsilon}$ nach Mellor und Yamada (1974) als $\bar{E}^{3/2}/c_3$ berechnet. Die Gleichung für die turbulente kinetische Energie kann so gelöst werden, daß dabei die bodennahen Flüsse entsprechend den Gleichungen (2-38) bis (2-40) berücksichtigt werden und somit bodennah gleiche Flüsse wie aus den Ansätzen für die Prandtschicht berechnet werden.

$\bar{E} - \bar{\varepsilon}$ - Ansatz

Analog zum Prandtl-Kolmogorov-Ansatz wird beim $\bar{E} - \bar{\varepsilon}$ - Ansatz die prognostische Gleichung (2-59) für die turbulente kinetische Energie \bar{E} gelöst. Zusätzlich wird für die Dissipation eine prognostische Gleichung verwendet (z.B. Detering, 1985; Detering und Etling, 1985; Wu und Schlünzen, 1992):

$$\frac{\partial \rho_0 \bar{\varepsilon}}{\partial t} = -\rho_0 \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial x_i} - c_4 \cdot \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{E}} \left(\rho_0 \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \overline{g u'_i \rho' \delta_{i3}} \right) - c_5 \cdot \rho_0 \frac{\bar{\varepsilon}^2}{\bar{E}} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_0 K_{E_i} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) \quad (2-60)$$

Der Diffusionskoeffizient wird berechnet als:

$$K_{mv} = c_6 \frac{\bar{E}^2}{\bar{\varepsilon}} \quad (2-61)$$

Auch bei diesem Ansatz lassen sich die freien Parameter so festlegen, daß die Flüsse in Bodennähe stetig sind. Da \bar{E} und $\bar{\varepsilon}$ über prognostische Gleichungen berechnet werden, kann beim $\bar{E} - \bar{\varepsilon}$ -

$\bar{\varepsilon}$ -Ansatz wie beim Prandtl-Kolmogorov-Ansatz der Transport turbulenter kinetischer Energie berücksichtigt werden. Zusätzlich kann auch ein Transport diffusiver Prozesse erfolgen, so daß die Diffusionskoeffizienten an einem Ort nicht nur lokalen, sondern auch advehierten Einflüssen unterliegen.

Ansatz nach Dunst (1982)

In diesem Ansatz werden die bodennahen Flüsse stärker bei der Festlegung der Diffusionskoeffizienten in der gesamten Grenzschicht berücksichtigt, als in den bisher genannten Ansätzen. Der Diffusionskoeffizient besitzt eine deutliche Profilstruktur, wird aber durch lokale Gradienten modifiziert. Der Ansatz wurde über eine Variationsmethode unter Berücksichtigung der Einflüsse von Wirbeln aus allen Höhenbereichen abgeleitet (Dunst, 1982; Dunst und Rhodin, 1990). Unter Bezug auf bestimmte Nebenbedingungen läßt sich im Gegensatz zu Stull (1984), bei dem die Matrix für die Effektivität der Vermischung vorbelegt und numerisch gelöst wird, eine analytische Lösung der Matrix finden. Der vertikale Diffusionskoeffizient erhält folgende Form:

$$K_{mv}(z) = \kappa u_* z_a \cdot \exp\left(-a_1 \frac{z - z_a}{z_i}\right) \cdot \frac{\sin(\pi z / z_i)}{\sin(\pi z_a / H_n)} \cdot \left\{1 - a_2 (a_3 - 0.5 a_3^2)\right\} \quad (2-62)$$

Die in diesem Ansatz enthaltenen freien Parameter lassen sich so festlegen, daß der Diffusionskoeffizient in der Inversionshöhe z_i Null wird und sich in einer Höhe z_a (z.B. 10 m) ein stetiger Übergang der Funktionen für die Diffusionskoeffizienten ergibt, die nach Gleichung (2-52) und (2-62) berechnet werden (Schlünzen, 1990; Schlünzen et al., 1994). Die Parameter a_1 bis a_4 und die Grenzschichthöhen z_i und H_n werden wie folgt festgelegt:

$$a_1 = 3\pi / \sqrt{15}$$

$$a_2 = \left\{1 - \frac{\sin(\pi z_a / H_n)}{\sin(\pi z_a / z_i) \phi_m(z/L)}\right\} / \left\{a_3|_{z_a} - 0.5 \cdot (a_3|_{z_a})^2\right\}$$

$$a_3 = \left\{(\sqrt{15}/2\pi) \cdot (z_i/z)\right\}^{0.134} Ri$$

$$z_i = H_n(1 - a_4 Ri) \quad \text{mit} \quad H_n = 1000\text{m}$$

$$a_4 = \begin{cases} 5.1 & \text{für } z/L > 0 \\ 1.5 & \text{für } z/L < 0 \end{cases}$$

2.4.1.4 Konvektion

Konvektive Prozesse werden in hochauflösenden Regionalmodellen meist nicht extra parametrisiert, da davon ausgegangen wird, daß sie aufgrund des feinen Gitters skalig berechnet werden können. Dieses gilt allerdings nur für Konvektionsstrukturen von einigen Kilometern Durchmesser. Kleinere konvektive Strukturen, wie sie z.B. über den Polarmeeren an der Eiskante entstehen können (Raasch, 1990; Chlond, 1992; Lüpkes und Schlünzen, 1995), lassen sich bei größerem Gitter nicht skalig berechnen. Sie müssen auch in Modellen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ wie in größerskaligen Modellen parametrisiert werden (z.B. Holtslag und Boville, 1993; Bao und Seaman, 1994; Wang und Seaman, 1994).

Zur Modellierung stark instabiler Schichtungen in der Prandtl-schicht wird, auch wenn konvektive Prozesse wirksam sind, nicht auf das "free convection scaling" von Wyngaard et al. (1971) zurückgegriffen, sondern es werden die gleichen Parametrisierungen benutzt, die auch bei nur leicht instabiler Schichtung in der Prandtl-schicht angewendet werden (Abschnitt 2.4.1.2). Auch in der planetaren Grenzschicht werden gelegentlich bei konvektiver Schichtung ähnliche Ansätze wie bei leicht instabiler Schichtung verwendet. Dabei wird z.B. Gleichung (2-56) benutzt, wobei die Funktion $f(Ri)$ schichtungsabhängig speziell für konvektive Bedingungen formuliert wird (z.B. Flassak, 1990). Entsprechende Ansätze liefern allerdings die typische Vertikalstruktur gemessener Temperatur- und Feuchteprofile nicht. Die im unteren Bereich der Grenzschicht neutrale bis leicht instabile und im oberen Grenzschichtdrittel leicht stabile Schichtung kann aber mit Ansätzen, die die "free convection velocity" einbeziehen, oder durch nicht-lokale Ansätze modelliert werden (z.B. Degrazia, 1989; Troen und Mahrt (1986); Holtslag und Moeng, 1991; Chrobok et al., 1992; Lüpkes und Schlünzen, 1995). In den genannten Ansätzen werden die beim "free convection scaling" verwendeten Skalierungsgrößen (Geschwindigkeit w_* , Grenzschichthöhe z_i) benutzt.

Der Ansatz von Degrazia (1989) für den Vertikalen Diffusionskoeffizienten $K_{\theta v}$ wurde aus Ähnlichkeitshypothesen für das Varianzspektrum der turbulenten kinetischen Energie abgeleitet; er lautet (vgl. Adrian, 1994):

$$K_{\theta v} = 0.15 w_* z_i \left(136 \frac{z}{z_i}\right)^{-1/3} \cdot \left\{ \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 + 0.75 \left(136 \frac{z}{z_i}\right)^{2/3} \right\}^{1/2} \cdot \left\{ 1 - \exp\left(-4 \frac{z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(8 \frac{z}{z_i}\right) \right\}^{4/3}$$

w_* bezeichnet die "free convection velocity":

$$w_* = \left(-\frac{g}{\theta} u_* \theta_* z_i \right)^{1/3} \quad (2-63)$$

Die Inversionshöhe kann für wachsende Grenzschichten nach Deardorff (1973) berechnet werden, interne Grenzschichten können damit aber nur schlecht erfaßt werden. Bei genügender Vertikalauflösung des Modells sollte die Inversionshöhe daher diagnostisch aus den Modellergebnissen ermittelt werden.

Die nicht-lokalen Ansätze von Holtslag und Moeng (1991) sowie Troen und Mahrt (1986) beruhen auf der bereits 1947 von Priestley und Swinbank postulierten und später von Deardorff wieder aufgenommenen Idee der gegen den lokalen Temperaturgradienten gerichteten Transporte ("counter gradient term", Priestley und Swinbank, 1947; Deardorff, 1972). Danach wird Ansatz (2-35) für horizontal homogene Verhältnisse um einen Transportterm Γ erweitert:

$$\overline{w'\theta'} = -K_{\theta v} \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} - \Gamma \right) \quad (2-64)$$

Verschiedene Messungen und Modellergebnisse belegen, daß die Transporte in der Atmosphäre tatsächlich bei bestimmten meteorologischen Bedingungen gegen den lokalen Gradienten erfolgen können (z.B. Schumann, 1987; Lüpkes et al., 1994).

Bei der Parametrisierung von Troen und Mahrt (1986) wird der Diffusionskoeffizient für Impuls K_{mv} als Funktion der Inversionshöhe z_i berechnet als

$$K_{mv} = \frac{\kappa u_* z}{\phi_m \left(\frac{z}{L} \right)} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \quad (2-65)$$

Dabei wird die Stabilitätsfunktion für instabile Schichtung ($z/L < 0$) abweichend von den Formulierungen in Abschnitt 2.4.1.2 berechnet als

$$\phi_m = (1 - 7z/L)^{-1/3} \quad \text{für} \quad -2 \leq z/L < 0 \quad (2-66)$$

K_{mv} kann mit Hilfe von Gleichung (2-55) in den Diffusionskoeffizienten für Wärme $K_{\theta v}$ umgerechnet werden, wobei Pr über das Verhältnis der Diffusionskoeffizienten in der Prandtschicht festgelegt wird. Damit die Flüsse stetig sind, müßte dabei auch der gegen den Gradienten gerichtete Transportterm Γ berücksichtigt werden (Lüpkes und Schlünzen, 1995).

Den von den lokalen Gradienten unabhängigen Wärmefluß Γ berechnen Troen und Mahrt entsprechend Deardorff (1973):

$$\Gamma = d_1 \frac{\overline{w'\theta'}|_s}{d_2 z_i} = d_1 \frac{g (u_* \theta_*)^2}{\theta w_*^3 d_2} \quad (2-67)$$

Dabei wird $d_1 = 6.5$ gesetzt und d_2 errechnet aus:

$$d_2 = \frac{u_*}{\phi_m} = \left(u_*^3 + 7 \frac{z}{z_i} \kappa w_*^3 \right)^{1/3} \quad (2-68)$$

Bei Holtslag und Moeng (1991) wird der Diffusionskoeffizient $K_{\theta v}$ für Wärme ähnlich berechnet als:

$$K_{\theta v} = w_* z_i \left(\frac{z}{z_i} \right)^{4/3} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \cong \frac{\kappa u_* z}{\left(-39 \frac{z}{L} \right)^{-1/3}} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \quad (2-69)$$

Der Wärmefluß Γ hängt von den turbulenten Flüssen in der Prandtl'schicht und den Fluktuationen des Vertikalwindes ab:

$$\Gamma = 2 \frac{g (u_* \theta_*)^2}{\theta w_*^2 \overline{w'^2}} \quad (2-70)$$

Die turbulenten Fluktuationen des Vertikalwindes ergeben sich zu:

$$\overline{w'^2}^{3/2} = \left(1.6 u_*^2 \left(1 - \frac{z}{z_i} \right) \right)^{3/2} + 1.2 w_*^3 \frac{z}{z_i} \left(1 - 0.9 \frac{z}{z_i} \right)^{3/2} \quad (2-71)$$

Beide Ansätze liefern ähnliche Diffusionskoeffizienten und gegen den Gradienten gerichtete Transporte. Beide sind, wie der Ansatz von Degrazia (1989), geeignet, um über homogenem Gelände bei konvektiver Schichtung realitätsnahe Profile zu berechnen.

2.4.1.5 Horizontale turbulente Flüsse

Die horizontale Diffusion muß in Regionalmodellen nicht unbedingt direkt berücksichtigt werden, da die genutzten numerischen Verfahren diffusiv sind (z.B. Gegenstrom-Differenzen), oder Filter verwendet werden, um das Anwachsen kurzer Wellen in den Modellergebnissen zu verhindern (vgl. Abschnitt 2.9). Beide Methoden weisen häufig eine der physikalischen Diffusion entsprechende oder sogar über sie hinausgehende vermischende Wirkung auf, so daß die physikalisch bedingte Diffusion nicht explizit modelliert werden muß. Werden wenig diffusive numerische Verfahren oder Filter verwendet, so muß die physikalisch bedingte Horizontaldiffusion parametrisiert werden. Beispielhafte Abschätzungen, unter welchen Bedingungen dieses erforderlich sein könnte, sind in ANHANG D zusammengestellt.

In der unteren Mikroskala kann von isotroper Turbulenz ausgegangen werden (Stull, 1988). Wirbel in größeren Skalen sind dagegen typischerweise anisotrop, wobei ihre Horizontalausdehnung im allgemeinen ihre Vertikalausdehnung übertrifft (Ausnahme: konvektive Strukturen). Die dreidimensionale Turbulenzstruktur hängt also von der charakteristischen Horizontalausdehnung der entstehenden Phänomene ab, wobei nur der Einfluß der subskaligen Wirbel in einem Modell parametrisiert werden muß. In Anbetracht der in hochauflösenden Regionalmodellen verwendeten Gitterweiten sind die darin zu parametrisierenden subskaligen Wirbel immer anisotrop.

Beim Ansatz von Smagorinsky (1963), der für Modelle der Makroskala und Mesoskala- α entwickelt wurde, wird der horizontale Diffusionskoeffizient ähnlich wie beim Mischungswegansatz als Funktion der Gitterweite und der Deformation des Strömungsfeldes festgelegt. Die Anisotropie der Wirbel wird dadurch berücksichtigt.

$$K_{mh} = \frac{\tau_2 (\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z)^{1/3}}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (2-72)$$

Mit diesem Ansatz wird über horizontal homogenem Gelände bei horizontal scherungsfreiem Strömungsfeld die Horizontaldiffusion unterschätzt. Um die Dreidimensionalität der Turbulenz zu berücksichtigen, sollte bei Nutzung des Ansatzes (2-72) der horizontale Diffusionskoeffizient mindestens dem vertikalen entsprechen.

Gelegentlich wird der horizontale Diffusionskoeffizient K_{mh} gleich dem vertikalen Diffusionskoeffizienten gesetzt, ohne bei Festlegung des Diffusionskoeffizienten Scherungen im horizontalen Strömungsfeld oder die unterschiedliche Horizontal- und Vertikalaufösung des Modells zu berücksichtigen (z.B. Flassak, 1990; Schumann et al., 1987). K_{mh} wird auch als ein festes Viel-

faches von K_{mv} festgelegt (z.B. Groß, 1988; Eppel et al., 1995; Adrian und Fiedler, 1991) oder der Proportionalitätsfaktor hängt von der Gitterweite ab (z.B. Schlünzen, 1990):

$$K_{mh} = r_1 \frac{\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}}{\Delta z} K_{mv} \quad (2-73)$$

Dabei liegt r_1 zwischen 0.4 und 0.8 (Dunst, 1980). Unter Voraussetzung gleicher Diffusionskoeffizienten bei äquidistantem Gitter sollte r_1 zu 0.7 festgelegt werden. Der Gleichung (2-73) liegt die Annahme zugrunde, daß das Verhältnis von horizontalem zu vertikalem Diffusionskoeffizienten proportional dem Verhältnis von horizontaler zu vertikaler Ausdehnung der kleinsten vom Gitter auflösbaren Turbulenzelemente ist und K_{mh}/K_{mv} nicht von der Stabilität der atmosphärischen Schichtung abhängt. Turbulente Vermischungsprozesse, die durch Scherungen im Horizontalwindfeld entstehen, werden bei der Festlegung des horizontalen Diffusionskoeffizienten nicht berücksichtigt.

Eine allgemeine Empfehlung für die Berechnung des horizontalen Diffusionskoeffizienten kann gegenwärtig nicht gegeben werden. Seine Festlegung muß unter Einbeziehung der diffusiven Wirkung der vom Modell verwendeten numerischen Verfahren und Filter erfolgen.

2.4.2 Wolkenmikrophysikalische Prozesse

Neben subskaligen Transporten aufgrund turbulenter und konvektiver Flüsse tritt als weiterer subskaliger Prozeß die Wolkenbildung auf. Die Wolken selbst können zwar in hochauflösenden Regionalmodellen skalig berechnet werden, die wolkenmikrophysikalischen Prozesse (z.B. Auto-konversion, Akkreszenz) sind aber subskalig und müssen parametrisiert werden. Die verfügbaren Parametrisierungen* sind geeignet, Flüssigwasser vorherzusagen (Clark und Gall, 1982; Groß, 1986; Nickerson et al., 1986; Chaumerliac et al., 1987; Lüpkes et al., 1989; Schlünzen et al., 1994), verschiedene Arten von Eis zu berücksichtigen (Levkov et al., 1989; Eppel et al., 1995), oder das Spektrum der Hydrometeore zu berechnen (z.B. Höller, 1986; Wang, 1993). Zur Modellierung der wolkenmikrophysikalischen Prozesse müssen Bilanzen entsprechend Gleichung (2-12) für die spezifische Feuchte, Wolken- und Regenwasser sowie für die im Modell berücksichtigten Klassen von Eisteilchen und Größenklassenbereiche gelöst werden.

* Bei jeder Wolkenparametrisierung muß auf die konsistente Umrechnung der genutzten Gleichungen und Koeffizienten in andere Einheiten geachtet werden. Da die Parametrisierungen Konstanten enthalten, die teilweise nicht in SI-Einheiten gegeben sind, dürfen sie keinesfalls ungeprüft aus der Literatur übernommen werden, sondern müssen unbedingt hinsichtlich der Maßeinheiten angepaßt werden.

Für die meisten Anwendungen hochauflösender Regionalmodelle, bei denen nicht die Wolkenbildung selbst, sondern ihr Effekt auf Wind-, Temperatur- und Feuchtefelder Ziel der Simulation ist, können aus ökonomischen Gründen komplexe Parametrisierungen mit aufgelöster Größenverteilung der Hydrometeore nicht verwendet werden. Statt dessen werden einfache Parametrisierungen genutzt, die fast alle auf dem Kessler-Schema (Kessler, 1969) beruhen und meist die Eisphase nicht berücksichtigen. Zu den Prozessen, die im einfachen Kessler-Schema vernachlässigt werden, da sie für die Niederschlagsbildung von untergeordneter Bedeutung sind, zählen z.B. das Kondensationswachstum der Regentropfen, die Sedimentation von Wolkentröpfchen, die Eisphase. Damit können weder Schnee noch Graupel oder Hagel modelliert werden. Diese Näherung ist auch dann bedeutsam, wenn kein fester Niederschlag den Boden erreicht, da häufig Eisteilchen bei der Niederschlagsbildung mitwirken. Eine Erweiterung des Kessler Schemas um die Eisphase ist aber möglich und unerlässlich, wenn die Niederschläge auch Eisteilchen enthalten.

Eine Empfehlung zur Verwendung einer bestimmten Parametrisierung kann an dieser Stelle nicht gegeben werden, da die notwendige Komplexität der Parametrisierung stark von den geplanten Anwendungen des Modells abhängt. Soll z.B. das Auswaschen von Schadstoffen aus der Atmosphäre simuliert werden, so muß mindestens die Anzahldichte der Wolkentröpfchen berechnet werden, da die Auswaschprozesse von der Flüssigwassermenge und vom Tropfenspektrum abhängen. (z.B. Flossmann und Pruppacher, 1988; Beheng, 1986). Für viele Modellanwendungen liefert das relativ einfache, weder bzgl. Speicherplatz noch bzgl. Rechenzeit besonders anspruchsvolle Kessler-Schema auch ohne Eisphase zufriedenstellende Ergebnisse. Dabei ist aber anzumerken, daß die Niederschlagsrate zu Beginn eines Niederschlagsereignisses meist überschätzt wird (Lüpkes, 1991). Die gewählte Parametrisierung ist in jedem Fall zu validieren, da wie bei anderen Parametrisierungen auch die Modellergebnisse von der verwendeten Parametrisierung maßgeblich beeinflusst werden (z.B. Johnson et al., 1993; Mölders und Laube, 1994).

2.4.3 Strahlungsflüsse

In Regionalmodellen werden die Strahlungsflüsse am Boden und in der Atmosphäre unterschiedlich parametrisiert. Die Flüsse am Boden lassen sich mit ausreichender Genauigkeit bei wolkenfreiem Himmel über sehr einfache Verfahren berechnen (z.B. Koch und Wippermann, 1983). Dabei wird, wie in der Atmosphäre, zwischen dem kurzwelligen und dem langwelligen Bereich unterschieden und der Einfluß der Atmosphäre über empirische Faktoren berücksichtigt, die aus Messungen abgeleitet wurden (z.B. Golchert, 1981; de Jong, 1973). In den Strahlungsflüssen am Boden müssen auch der Einfluß der Hangneigung (z.B. Pielke, 1984) und der Abschattung durch

Berge (z.B. Schlünzen et al., 1994) berücksichtigt werden, um die Erwärmung aufgrund der Einstrahlung nicht zu unter- oder überschätzen.

Die Grundlagen der Parametrisierung von Strahlungsflüssen in der Atmosphäre sind bei Stephens (1984) und Pielke (1984, Kapitel 8) zusammengefaßt dargestellt und sollen hier nicht wiederholt werden. In hochauflösenden Regionalmodellen wird zur Berechnung der Divergenz der Strahlungsflüsse maximal eine Zweistrom-Approximation genutzt. Dabei wird die Strahlungsbilanz säulenweise gelöst, laterale Einflüsse (z.B. seitliche Abstrahlung von Wolken, Abschattung durch Wolken) werden nicht berücksichtigt. Die kurzweilige Einstrahlung wird dadurch überschätzt, so daß zu hohe Bodentemperaturen berechnet werden (Kinne und Bergstrom, 1995). Bessere Strahlungsparametrisierungen, wie z.B. 6-Strom-Approximationen sind gegenwärtig aber noch zu rechenzeitintensiv, um in komplexen Regionalmodellen Anwendung zu finden. Die durch die Zweistrom-Approximation bedingten Ungenauigkeiten (geringfügig erhöhte Erwärmungsraten) müssen daher hingenommen werden. Bei wolkenlosem Himmel kann sogar, wie einleitend erwähnt, auf eine Parametrisierung der atmosphärischen Strahlungsflüsse ganz verzichtet werden, oder es lassen sich einfache empirische Ansätze verwenden (z.B. Schlünzen, 1990).

2.4.4 Quellnahe Transporte

Emissionen gelangen vor allem aus Punkt-, Flächen- und Linienquellen in die Atmosphäre, wobei es sich um kalte oder warme Quellen handeln kann. Die genannten Quellarten sind recht häufig und sollten in hochauflösenden Regionalmodellen für den Stofftransport berücksichtigt werden. Besitzen die Quellen deutlich von der Umgebung abweichende thermodynamische oder dynamische Eigenschaften (z.B. Strahlquellen), so müssen die damit verbundenen Kräfte, die Abwärme sowie Feuchteüberschüsse im gesamten Differentialgleichungssystem berücksichtigt werden. Dieses erfordert u.a. Erweiterungen der Bewegungsgleichungen und des 1. Hauptsatzes. Daher werden Quellen mit Eigendynamik in hochauflösenden Regionalmodellen meist nicht berücksichtigt, sondern es werden speziell für z.B. impulsbehaftete Emissionen entwickelte Modelle verwendet.

Sollen mit einem mesoskaligen Modell Transportrechnungen durchgeführt werden, so können diese grundsätzlich mit Hilfe von Modellen des Lagrange- oder des Euler-Typs durchgeführt werden (van Egmond und Kesseboom, 1983). Lagrange'sche Partikelmodelle sind besonders gut geeignet, wenn wenige Quellen betrachtet werden und chemische Umsetzungen keine Bedeutung haben. Sie ermöglichen, den Stofftransport ohne numerische Diffusion zu berechnen und Quellen an der tatsächlichen Quellposition zu berücksichtigen. Aufwendiger ist es, mit einem

Lagrange'schen Partikelmodell chemische Umsetzungen zu modellieren, da dafür zu jedem Zeitschritt Konzentrationen der Stoffe und nicht nur die Partikelzahlen benötigt werden. Manins und Hurley (1994, persönliche Mitteilung) berücksichtigen chemische Umsetzungen in einem Lagrange'schen Partikel-Modell, indem sie die Stoffkonzentrationen auf einem Euler'schen Hilfsgitter berechnen. Die chemischen Umsetzungen werden dann nach jedem Zeitschritt den einzelnen Partikeln wieder zugeordnet. Chemische Umsetzungen lassen sich leichter modellieren, wenn ein Lagrange'sches Trajektorienmodell verwendet wird. Ist dieses wie bei Hertel et al. (1995) am Rezeptorpunkt orientiert, so treten in einem derartigen Säulentransportmodell grundsätzlich die gleichen Probleme auf, wie sie auch in einem Euler-Modell entstehen*. Chemische Umsetzungen lassen sich direkt berücksichtigen, Punktquellen können aber aufgrund der Gitterstruktur nicht an ihrem eigentlichen Quellort berücksichtigt werden, sondern die Emissionen müssen dem umgebenden Gittervolumen zugeordnet werden. Je größer dieses ist, desto geringer ist die mittlere Konzentration im Quellvolumen. Dadurch werden die quellnahen Konzentrationen unterschätzt und die quellnahe Diffusion überschätzt. Letztere kann in einem Euler-Modell durch ein feines Gitter oder durch genestete Modelle reduziert werden (z.B. Bigalke, 1992).

Sowohl in Euler- als auch in Lagrange-Modellen muß der quellnahe Auftrieb emittierter Stoffe berücksichtigt werden, um realitätsnahe Austrittsgegebenheiten zu modellieren. Dieses kann über einfache Schornsteinüberhöhungsformeln (Hanna, 1982) oder genestete Integralmodelle (Bigalke und Schatzmann, 1989; Bigalke, 1991) erfolgen. In beiden Fällen wird der quellnahe Auftrieb im Modell berücksichtigt, aber nur durch ein Integralmodell wird auch der während des Auftriebes stattfindende advektive Transport sowie die diffusive Vermischung der emittierten Stoffe modelliert.

Die aufgeführten Probleme bei der quellnahen Transportmodellierung (quellnahe Diffusion, Wärmeabgabe) spielen bei den meisten Anwendungen mesoskaliger Transport- und Strömungsmodelle nur eine untergeordnete Rolle, da die Emissionsbedingungen oftmals nicht genau genug bekannt sind. Häufig werden auf Flächen bezogene Emissionskataster verwendet, wodurch bereits eine räumliche Mittelung der Emissionsdaten erfolgt ist. Die zusätzliche vertikale Mittelung der Emissionsdaten ist demgegenüber meist von untergeordneter Bedeutung†. Auf Flächen bezogene Emissionskataster enthalten im allgemeinen auch keine Angaben über die Wärmeemissionen der darin zusammengefaßten Quellen. Damit können bei Modellrechnungen auf Basis derartiger Kataster meist keine warmen Quellen berücksichtigt werden.

* In einem Trajektorienmodell muß die laterale Diffusion durch Vergrößerung der Säulenfläche berücksichtigt werden, um den in der Atmosphäre wirkenden diffusiven Prozessen gerecht zu werden. Dadurch kann bei am Rezeptor orientierten Modellen die quellnahe Diffusion sehr hoch werden.

† Hierbei ist vorausgesetzt, daß die Grenzschicht vertikal aufgelöst modelliert wird.

In Hinblick auf die genannten Ungenauigkeiten bei den Emissionen und das leichtere Berücksichtigen chemischer Umsetzungen sind Euler-Modelle und Säulentransportmodelle für hochauflösende Regionalmodelle geeigneter als Lagrange'sche Partikelmodelle. Dabei ist zu beachten, daß die an den Rezeptor oder die Quelle orientierten Säulentransportmodelle, laterale Transporte kaum realitätsnah berücksichtigen können. Zudem sind sie nicht mehr ökonomisch zu betreiben, wenn Konzentrationsverteilungen im gesamten Modellgebiet berechnet werden sollen. Dafür sind Euler-Modelle besser geeignet. Soll dagegen die Auswirkung weniger Punktquellen auf die Luftbelastung in einem bestimmten Gebiet untersucht werden, so sind Lagrange'sche Partikelmodelle oder an den Quellen orientierte Säulentransportmodelle gut einsetzbar. Insbesondere in Lagrange'schen Partikelmodellen lassen sich auch die Quellbedingungen gut berücksichtigen. Sie sind dafür besser geeignet als Euler-Modelle, es sei denn, in diesen wird die quellnahe numerisch bedingte Diffusion durch ein feines Gitter oder ein genestetes Modell vermindert.

2.4.5 Deposition

Die Ablagerung von Stoffen auf Bewuchs und Boden kann über Sedimentation* und aufgrund trockener, nasser und feuchter Deposition erfolgen. Zur Berücksichtigung der trockenen Deposition gibt es in der Literatur bereits für hochauflösende Regionalmodelle nutzbare Ansätze, einige auch für die nasse, noch keine für die feuchte Deposition. Die Depositionsmodellierung kann dabei in Lagrange- und Euler-Modellen nach der gleichen Methode erfolgen†. Dabei müssen die Parametrisierungen selbstverständlich an den anderen Modelltyp angepaßt werden, was in Lagrange'schen Partikelmodellen beispielsweise durch ein Hilfsgitter erfolgen kann, auf dem chemische Umsetzungen und Depositionsprozesse gelöst werden. In Lagrange'schen Trajektorienmodellen können die gleichen Formulierungen wie im Euler-Modell verwendet werden.

2.4.5.1 Trockene Deposition

Die trockene Ablagerung von Gasen und Partikeln auf Bewuchs, Böden und in Gewässer wird als trockene Deposition bezeichnet. Sie kann für Gase und Partikel berechnet werden als:

* Unter Sedimentation wird die Ablagerung von Partikeln aufgrund ihres Gewichtes verstanden. Kleine Partikel und Gase können nur deponieren.

† Manins und Hurley (1994, persönliche Mitteilung) verwenden das von Schlünzen und Pahl (1992) erweiterte und von diesen in einem Euler-Modell verwendete Widerstandsmodell nach Walcek et al. (1986) in einem Lagrange'schen Partikelmodell.

$$F_D = \overline{w'\chi'} = -v_{D\chi}\overline{\chi} \quad (2-74)$$

Dabei bezeichnet $v_{D\chi}$ die Depositionsgeschwindigkeit für einen Stoff χ und das Produkt beider Größen den Fluß F_D zum Boden und damit die trockene Deposition des Stoffes. Je nach meteorologischer Situation und sonstigen Gegebenheiten kann diese unter Umständen einen erheblichen Anteil an der insgesamt an Vegetation und Erdoberfläche abgelagerten Stoffmenge haben (z.B. Hicks et al., 1989).

Die Depositionsgeschwindigkeit $v_{D\chi}$ hängt von den Stoffeigenschaften, der meteorologischen Situation und den Oberflächeneigenschaften ab. Sie kann als Kehrwert in Reihe geschalteter Widerstände berechnet werden, wobei höhenkonstante Flüsse vorausgesetzt werden* (vgl. Roth, 1975; Chang et al., 1987):

$$v_{D\chi} = \frac{1}{R_a + R_{m\chi} + R_{o\chi}} \quad (2-75)$$

Für Gase werden Widerstände der Oberfläche ($R_{o\chi}$), der viskosen Schicht ($R_{m\chi}$) und der Atmosphäre (R_a) berücksichtigt (z.B. Sehmel, 1980). Zur Modellierung der Ablagerung feiner Partikel (Durchmesser $< 0.1 \mu\text{m}$) wird analog vorgegangen. Die Oberflächenwiderstände $R_{o\chi}$ hängen von den Bewuchs- und Stoffeigenschaften ab und werden bewuchs- und stoffspezifisch vorgegeben. Da sich die Aufnahmefähigkeit des Bewuchses bei Einstrahlung bis zu einer bestimmten Grenze vergrößert, hängt der Oberflächenwiderstand auch von der kurzwelligen Einstrahlung ab. Zudem kann er sich bei Taubildung bzw. bei feuchten Oberflächen gegenüber einer trockenen Oberfläche drastisch erhöhen (z.B. Ozon) oder vermindern (z.B. Schwefeldioxid). Dieser Prozeß wird näherungsweise bei Festlegung der Widerstände berücksichtigt, wobei meist von einer unbegrenzten Aufnahmefähigkeit der Oberfläche und ihres Bewuchses für den betreffenden Stoff ausgegangen wird. Werte für Oberflächenwiderstände sind z.B. bei Walcek et al. (1986) zu finden.

Bei Partikeln mit einem Durchmesser von mehr als $0.1 \mu\text{m}$ wird davon ausgegangen, daß sie nicht inkorporiert werden, sondern sich nur an der Oberfläche anlagern (Voldner et al., 1986). Dementsprechend kann der Oberflächenwiderstand vernachlässigt werden. Die Ablagerung hängt aber trotzdem stark von den Oberflächeneigenschaften ab, so daß die Widerstände der viskosen Schicht (R_m) bei Partikeln je nach Oberfläche unterschiedlich berechnet werden (z.B. Voldner et al., 1986). Für Gase wird der Widerstand in der viskosen Schicht dagegen als Funktion der Schubspannungsgeschwindigkeit und der Oberflächeneigenschaften berechnet (z.B. Garratt und Hicks,

* Die Annahme höhenkonstanter Stoffflüsse ist über inhomogenem Gelände ebenso fehlerbehaftet, wie dieses für die Turbulenzparametrisierung gilt. Die Voraussetzung wird bei schnellen chemischen Umsetzungen in Bodennähe noch weniger erfüllt (vgl. Kramm, 1989; Schlünzen und Niemeier, 1995).

1973; Brutsaert, 1975; Wesely und Hicks, 1977). Sowohl bei Gasen als auch bei Partikeln werden die atmosphärischen Widerstände R_a als Funktion der Windgeschwindigkeit und Schichtung unter Verwendung der Gleichungen (2-38) bis (2-40) festgelegt.

Für die Modellierung der trockenen Deposition von Gasen liegen bereits ausreichend viele Messungen und Modelluntersuchungen vor, um sie in einem hochauflösenden Regionalmodell berücksichtigen zu können (z.B. Dovland und Eliassen, 1976; Little, 1977; Wesely und Hicks, 1977; Walcek et al., 1986; Chang et al., 1987; Arritt et al., 1988; Joffre, 1988; Nicholson, 1988; Kramm, 1989; Michaelis et al., 1990; Schlünzen und Pahl, 1992; Schreiber et al., 1993; Spokes et al., 1993; Schlünzen et al., 1995). Der bei Voldner et al. (1986) beschriebene Ansatz für die Partikeldeposition kann ebenfalls genutzt werden, doch entstehen insbesondere über feuchten Oberflächen erhebliche Abweichungen zu gemessenen Werten (vgl. Schlünzen et al., 1995). Dieses liegt vor allem daran, daß z.B. sulfathaltige Aerosole bei entsprechender Feuchtigkeit anwachsen und schwerer werden können, wodurch die Depositionsgeschwindigkeit von der Feuchte und dem Aerosoltyp abhängig ist (z.B. Slinn, 1983). Soll die Partikelablagerung realitätsnah modelliert werden, muß das Aerosolwachstum durch Feuchte im Modell genauer als bei Voldner et al. (1986) vorgeschlagen berücksichtigt werden.

2.4.5.2 Nasse Deposition

Werden Gase und Partikel durch Niederschläge aus der Atmosphäre entfernt, so wird dieser Prozeß als nasse Deposition bezeichnet. Er hängt von den Eigenschaften des betrachteten Stoffes (z.B. Wasserlöslichkeit, Partikelgröße, Gas), der Tröpfchengröße und der Niederschlagsmenge ab, wobei die Zusammenhänge sehr komplex sind (z.B. Hales, 1987; Wang et al., 1990; Lim et al., 1991; McGann und Jennings, 1991). Eine Zusammenstellung von gegenwärtig in Modellen genutzten Ansätzen hat Flossmann (1994) erstellt. Viele der dort aufgeführten Ansätze zur Parametrisierung der nassen Deposition setzen eine komplexe Wolkenparametrisierung voraus, die in den meisten hochauflösenden Regionalmodellen aus Rechenzeit- und Speicherplatzgründen aber nicht verwendet wird (vgl. Abschnitt 2.4.2). Auch chemische Umsetzungen in der Flüssigphase (z.B. Jaeschke, 1986) werden gegenwärtig nur selten berücksichtigt. Aus beiden Gründen lassen sich daher zur Zeit nur relativ einfache Parametrisierungen für das Auswaschen von Stoffen realisieren.

Eine einfache Möglichkeit besteht in der Nutzung von Auswaschfaktoren, wie sie sich aus Messungen leicht ableiten lassen. Sie bezeichnen das Verhältnis von Konzentrationen in Bodennähe und im Niederschlag und ergeben so Übertragungsraten für die Verhältnisse in Bodennähe.

Derartige Ansätze sind gut für Modelle der Mesoskala- α oder noch größerskalige Modelle geeignet, wenn diese eine geringe Vertikalauflösung aufweisen. Die Methode kann aber nur als sehr grobe Näherung betrachtet werden, da der Niederschlag durch Gebiete unterschiedlicher Konzentration gefallen sein kann. Beispielsweise sind die Konzentrationen in der Nähe einer hohen Quelle in größerer Höhe höher als am Boden, so daß mit Hilfe von Auswaschfaktoren berechnete Konzentrationen im Niederschlag in dieser Situation wahrscheinlich unterschätzt würden. Besser sind Ansätze, die auch die Entstehung und das Fallen des Niederschlages berücksichtigen.

Neben sehr komplexen Ansätzen, die, wie oben erläutert, gegenwärtig aus Speicherplatz- und Rechenzeitgründen in Regionalmodellen noch nicht realisierbar sind, kann auch ein relativ einfacher Ansatz nach Seinfeld (1986) verwendet werden. Die nasse Deposition F_w läßt sich für Gase einer Konzentration C berechnen als (z.B. Bigalke und Schatzmann, 1994):

$$F_w = \int_0^{z_i} A_w \cdot C \cdot dz \quad (2-76)$$

Dabei bezeichnet A_w den Auswaschkoeffizienten, der von der Niederschlagsrate und dem betrachteten Stoff abhängt. Er kann z.B. nach Martin (1984), Tremblay und Leighton (1986) oder, abhängig vom Tropfenspektrum, z.B. nach Beheng (1986) festgelegt werden.

Der Ansatz (2-76) setzt voraus, daß das Auswaschen ein irreversibler Prozeß ist und berücksichtigt weder das Verdunsten des fallenden Tropfens noch chemische Umsetzungen. Da die chemischen Umsetzungen in der Flüssigphase sehr rasch ablaufen, ist Ansatz (2-76) nur als eine erste Näherung anzusehen. Ansätze, wie sie bei Chaumerliac et al. (1987, 1990) oder Flossmann und Pruppacher (1988) sowie Wurzler et al. (1994) genutzt werden, geben die Auswaschprozesse besser wieder, zumal auch die chemischen Umsetzungen in der Flüssigphase berücksichtigt werden.

Aufgrund ihrer Bedeutung für die Gesamtdosition sollten in einem hochauflösenden Regionalmodell auch Niederschlagsprozesse und die damit verbundene nasse Deposition berücksichtigt werden. Nur dann lassen sich realitätsnahe Ergebnisse der Konzentration und der abgelagerten Stoffmenge erhalten. Um die komplexen Vorgänge in der Atmosphäre wenigstens näherungsweise zu berücksichtigen, sollte mindestens ein Ansatz nach Gleichung (2-76) in einem hochauflösenden Regionalmodell genutzt werden. Komplexere Ansätze, in denen chemische Umsetzungen und die Verdunstung der Niederschläge berücksichtigt werden, sind anzustreben.

2.4.5.3 Feuchte Deposition

Mit feuchter Deposition wird die durch Impaktion von Wolkentröpfchen an Hindernissen bewirkte Ablagerung von im Wolkenwasser enthaltenen Stoffen an den auskämmenden Oberflächen bezeichnet. Die physikalischen und chemischen Zusammenhänge sind, wie bei der nassen Deposition, sehr komplex.

Eine einfache Möglichkeit, die feuchte Deposition näherungsweise zu simulieren, bestände darin, die pro Zeitschritt abgelagerte Wolkenwassermenge in Gleichung (2-76) zu berücksichtigen und damit die nasse und die feuchte Deposition zusammenzufassen. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Auswaschkoeffizienten A_w auf das "Auskämmen" der Wolkentropfen übertragbar sind. Dieses ist nur eine grobe Näherung der wahren Gegebenheiten.

Ein anderer Ansatz bietet der in Abschnitt 2.4.5.2 erwähnte Auswaschfaktor, dessen Verwendung aber die realen Bedingungen ebenfalls nur genähert wiedergibt.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, das auch von Krugmann und Winkler (1989) für einen Tannenwald benutzte Wolkentropfendepositionsmodell von Lovett (1984) an ein hochauflösendes Regionalmodell anzupassen. Hierfür werden, neben meteorologischen Zustandsgrößen oberhalb des Bewuchses, die Tropfengrößenverteilung und die Vertikalverteilung des Blattflächenindex benötigt. Die Bewuchsschicht wird vertikal aufgelöst berechnet. Aus dem Lovett-Modell ließe sich ein Ansatz entwickeln, der ähnlich dem Widerstandsmodell für die trockene Deposition aufgebaut ist (Abschnitt 2.4.5.1). Eine neu festzulegende "Auskämmgeschwindigkeit" müßte dann vom Wolkentropfenspektrum, den Stoffeigenschaften und vom Blattflächenindex bzw. von der Art und Dichte des Bewuchses oder der Bebauung abhängen.

Wie bei der nassen Deposition werden in den drei vorgeschlagenen Ansätzen für die feuchte Deposition chemische Umsetzungen im Tropfen vernachlässigt. Da die physikalischen und chemischen Zusammenhänge aber noch nicht ausreichend geklärt sind, gibt es gegenwärtig für die feuchte Deposition außer den angeführten Ansätzen keine Parametrisierung, die in Regionalmodellen nutzbar wäre. Da auch die angedachten Parametrisierungen noch nicht erprobt sind, läßt sich der Effekt der feuchten Deposition in hochauflösenden Regionalmodellen noch nicht befriedigend berücksichtigen.

2.5 Randwerte

Das Modellgebiet ist bei einem Regionalmodell nicht global, sondern besitzt neben vertikalen auch horizontale Begrenzungen. Dadurch liegen fünf Ränder innerhalb der Atmosphäre und nicht zwischen verschiedenen Medien, wie dieses für den unteren Rand des Modells am Boden gilt. Die Randbedingungen müssen an den offenen Rändern so formuliert werden, daß Phänomene, die im Modellgebiet entstehen, störungsfrei durch die Ränder gelangen können und sich gleichzeitig großräumige Phänomene von außen in das Modellgebiet hineinbewegen können. Außerdem muß bei der Wahl der Randbedingungen darauf geachtet werden, daß das gekoppelte Differentialgleichungssystem nicht überbestimmt wird und die gewählten Randwerte das Differentialgleichungssystem erfüllen. Beispielhaft sei hier angeführt, daß die randnormalen Komponenten des Geschwindigkeitsvektors mit der Druckgradientkraft gekoppelt sind (vgl. ANHANG B) und damit beide Randwerte nicht unabhängig voneinander festgelegt werden können (siehe z.B. Clark, 1977; Schumann und Volkert, 1984; Schlünzen, 1990).

In der Literatur sind verschiedenste Formulierungen für die Randbedingungen zu finden. In diesem Abschnitt werden beispielhaft einige Randbedingungen aufgeführt, die die oben aufgeführten Bedingungen erfüllen.

2.5.1 Zeitabhängige Randwerte - Nesting

Da mit einem mesoskaligen Modell nur ein geographischer Ausschnitt der globalen Strömungs-, Temperatur- und Feuchtefelder simuliert werden kann, müssen Veränderungen in der größeren Skala dem Modell vorgegeben werden. Im allgemeinen erfolgt dieses durch die Vergabe zeitabhängiger Randwerte. Diese sind zunächst in Mesoskala- α Modellen genutzt worden (z.B. Perkey und Kreitzberg, 1976; Davies, 1976; Kurihara und Bender, 1983) und später auch in höherauflösenden Modellen verwendet worden (Clark und Farley, 1984; Pielke et al., 1992; Walko et al., 1994; Moussiopoulos, 1994; Schatzmann und Schlünzen, 1995). Dabei werden Modelle sowohl einseitig als auch zweiseitig (interaktiv) genestet. Bei einseitigem Nesting wird das Modell mit zeit- und ortsabhängigen Werten an den Rändern angetrieben. Die Ergebnisse wechselwirken nicht mit dem Modell, mit dem die Antriebswerte berechnet werden. Diese Rückkoppelung wird bei zweiseitigem Nesting berücksichtigt. Bei beiden Methoden müssen die Werte der verschiedenen Modelle entsprechend den verwendeten numerischen Gittern (vgl. Abschnitt 2.8) räumlich und zeitlich auf gleiche Punkte interpoliert werden.

Ein zweiseitiges Nesting ist erforderlich, wenn von den mit dem höher auflösenden Modell berechneten Phänomenen eine Rückkopplung auf Phänomene im gröber auflösenden Modell zu erwarten ist und diese simuliert werden soll. Andernfalls reicht auch ein einseitiges Nesting aus, bei dem die Ergebnisse des gröber auflösenden Modells die des höher auflösenden beeinflussen. Das Nesting kann dadurch realisiert werden, daß aus der Lösung des groben (Ψ_g) und des hochauflösenden Modells (Ψ_h) eine angepaßte Lösung (Ψ_f) folgender Form gebildet wird:

$$\Psi_f = (1 - \alpha)\Psi_h + \alpha\Psi_g \quad (2-77)$$

Dabei bezeichnet α den Anpassungskoeffizienten ("Nudging-Coefficient"), der am Rand des höher auflösenden Modells den Wert 1 annimmt und mit zunehmender Entfernung vom Rand in Richtung Modellinneres abnimmt. Sein Wert wird in verschiedenen Modellen unterschiedlich festgelegt (z.B. Perkey und Kreitzberg, 1976; Davies, 1976; Kållberg, 1977; Lehmann, 1993). Eine allgemeine Empfehlung kann hierzu nicht gegeben werden. Die Anpassung sollte aber möglichst unabhängig vom verwendeten Zeitschritt sein und keine Reflexionen auslösen.

Physikalisch entspricht die forcierte Lösung Ψ_f der Lösung der um einen linearen Diffusionsterm erweiterten ursprünglichen Modellgleichungen (Lösung Ψ_h). Dieses ist nach Umstellung von Gleichung (2-77) leicht zu erkennen:

$$\Psi_f = \Psi_h - \alpha(\Psi_h - \Psi_g) \quad (2-78)$$

Da der Anpassungskoeffizient α zum Rand des höher auflösenden Modells hin zunimmt, bedeutet dies eine zum Rand hin abnehmende Phasengeschwindigkeit der aus dem Gebiet herauswandernden Störungen. Gleichzeitig können kurze Wellen am Rand entstehen, die gegebenenfalls im Modell gefiltert werden müssen (Perkey und Kreitzberg, 1976).

In Anbetracht der möglichen Einflüsse auf die Modellergebnisse sollte ein Nesting von Modellen bzw. die Nutzung zeitabhängiger Randwerte nur erfolgen, wenn die zeitabhängige großräumige meteorologische Situation die mesoskaligen Modellergebnisse maßgeblich beeinflusst. Dann sollte insbesondere bei Interpretation der Modellergebnisse im Bereich der angepaßten Randwerte bedacht werden, daß die Phasengeschwindigkeiten im grobauflösenden und im hochauflösenden Modell unterschiedlich sind. Dadurch können sich Strukturen entwickeln, die nicht der Realität entsprechen. Diese können an allen offenen Rändern des Modells entstehen, da das Nesting meist sowohl für den Modelloberrand als auch für die seitlichen Ränder verwendet wird.

2.5.2 Seitliche Ränder

In vielen Regionalmodellen werden die externen Änderungen der vorhergesagten Größen vernachlässigt, und die Randwerte werden nicht forciert. Damit Störungen das Modellgebiet reflektionsfrei verlassen können, werden meist Strahlungsrandbedingungen nach Orlandi (1976) benutzt, wobei auch darauf aufbauende zwei- und dreidimensionale Formulierungen angewendet werden (Raymond und Kuo, 1984; Schlünzen, 1988). Wie Arbeiten von Bigalke und Schlünzen (1991, unveröffentlicht) gezeigt haben, reicht es aus, die Strahlungsrandbedingungen nur zur Berechnung der Advektionsgeschwindigkeit für die randnormale Geschwindigkeit am Einströmrand zu verwenden, um geringe Reflexionen zu gewährleisten. Wird zusätzlich die randnormale Advektion am Ausströmrand z.B. mit Gegenstromdifferenzen diskretisiert, können in der entsprechenden Bewegungsgleichung bei geeigneter Gitterwahl (vgl. Abschnitt 2.8) alle anderen Terme direkt gelöst werden (Schlünzen et al., 1994). Dadurch ist freies Ein- und Ausströmen an allen seitlichen Rändern gewährleistet.

Für die randparallelen Komponenten des Windvektors und alle anderen Größen können Neumann Randbedingungen der Form

$$\left. \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_i} \right|_n = 0 \quad (2-79)$$

verwendet werden. Dabei muß darauf geachtet werden, daß die Randbedingungen für den gleichen Ort im Raum formuliert werden (vgl. Abschnitt 2.8) und das gekoppelte Differentialgleichungssystem auch in diskretisierter Form erfüllt bleibt.

2.5.3 Oberer Rand

Der obere Rand z_t des Modells ist wie die seitlichen Ränder keine physikalisch bedingte Grenze, sondern offen. Trotzdem werden hierfür häufig feste Werte vorgegeben und die dadurch mögliche Reflexion von Wellen über absorbierende Schichten verhindert (Clark, 1977; Durran, 1981). Die absorbierenden Schichten sind analog zum Nesting-Verfahren durch einen zusätzlichen Rayleigh-Dämpfungsterm in den Modellgleichungen realisiert (vgl. Abschnitt 2.5.1). Da die Lösungen durch die absorbierenden Schichten beeinflusst werden, muß das interessierende Modellgebiet um das Gebiet der absorbierenden Schichten erweitert und die Differentialgleichungen müssen im dementsprechend vergrößerten Modellgebiet gelöst werden.

Werden die Vertikalgeschwindigkeiten am Oberrand des Modells zeitabhängig berechnet, so läßt sich dieser dann offene Rand durch implizite Berechnung des Druckfeldes oder über Fouriertransformationen des Vertikalwindfeldes realisieren (z.B. Klemp und Durran, 1983; Bougeault, 1983). Diese Randbedingung ist besonders gut für hydrostatisch approximiert rechnende Modelle geeignet, da bei der Berechnung des Druckfeldes meist Hydrostasie vorausgesetzt wird. Der Fehler, der durch Nutzung der hydrostatischen Approximation am Oberrand in einem nicht-hydrostatischen Modell entsteht, ist aber gering und auf den oberen Bereich des Modells beschränkt (Adrian, 1994).

2.5.4 Unterer Rand

Der untere Rand des Modells bildet eine physikalische Grenze zwischen verschiedenen Medien. In Hinblick auf die in Modellen genutzten Parametrisierungen (Abschnitt 2.4) sollte der untere Rand in der Höhe z_0 über Grund liegen. Dann kann für den Wind die Haftbedingung verwendet und die Flüsse können nach den Gleichungen (2-38) und (2-39) berechnet werden. Für den oberflächen-normalen Druckgradienten kann aus Gleichung (B-1) eine Differentialgleichung abgeleitet werden, wobei die Randbedingungen für den Wind berücksichtigt werden müssen.

Temperatur und Feuchte werden für bestimmte Anwendungsfälle fest vorgegeben. Falls in derartigen Fällen die großskaligen Werte ebenfalls konstant sind, liefert das mesoskalige Modell schließlich stationäre Lösungen der jeweiligen Situation. Bei realitätsnahen Modellanwendungen muß jedoch die tageszeitliche Änderung berücksichtigt werden. Dafür sollten Bodentemperatur und -feuchte zeitabhängig vorgegeben oder berechnet werden.

Eine realitätsnahe Vorgabe des Tagesgangs der Bodenwerte ist vor allem über komplex gegliedertem Gelände schwierig und aufwendig. Daher ist eine Berechnung der Bodentemperatur und -feuchte ihrer Vorgabe vorzuziehen. In atmosphärischen Modellen werden die Bodentemperaturen aus einer Bilanz der Energieflüsse am Boden berechnet:

$$Q_L + Q_S + Q_R + Q_{Ant} = Q_G \quad (2-80)$$

Dabei bezeichnet Q_G die Wärmeleitung in den Boden, Q_L und Q_S den latenten und fühlbaren Wärmefluß, Q_R die Bilanz der kurz- und langwelligen Strahlungsflüsse (vgl. Abschnitt 2.4.3) und Q_{Ant} anthropogene Wärmequellen. Die meisten Flüsse sind bereits bei den Parametrisierungen genannt worden (Abschnitt 2.4), so daß an dieser Stelle nur noch die anthropogene Wärmeerzeugung und die Wärmeleitung in den Boden spezifiziert wird. Typische Werte für anthropogene

Wärmeabgaben liegen für bebauten Gelände zwischen 4 W/m^2 in Außenbezirken von Städten und 100 W/m^2 in dicht besiedelten innerstädtischen Bereichen (Pielke, 1984; Seite 399). Die Wärmeabgaben hängen dabei von der Jahres- und Tageszeit (z.B. Heizung, Klimaanlage) sowie von der Nutzung (Wohn-, Gewerbe-, Industriegebiet) des zu modellierenden Gebietes ab.

Der Wärmefluß in den Boden $Q_G = v_s \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right)$ erfolgt über molekulare Diffusion im Boden und hängt von der Bodenart ab. Er kann über eine Wärmeleitungsgleichung wie folgt berechnet werden:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{v_s}{\rho_s c_s} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right) \quad (2-81)$$

Dabei bezeichnet v_s die thermische Leitfähigkeit, ρ_s die Dichte im Boden und c_s die spezifische Wärmekapazität des Bodens. Die Gleichung muß für verschiedene Tiefen im Boden gelöst werden, oder der Wärmefluß wird vereinfacht proportional zum Temperaturgradienten zwischen Oberfläche und einer Schicht der Tiefe h_θ gesetzt (z.B. Tiedtke und Geleyn, 1975; Deardorff, 1978). Diese sogenannte force-restore-Methode liefert nach Deardorff (1978) ebenso gute Ergebnisse wie die vollständige Lösung der Diffusionsgleichung und erlaubt zusätzlich eine einfache, prognostische Lösung der Bodenenergiebilanzgleichung (2-80). In diesem Verfahren können die Einflüsse des Bewuchses auch indirekt durch entsprechend modifizierte Bodeneigenschaften berücksichtigt werden (z.B. Schlünzen et al., 1994). Liegen genügend Informationen über Bodenarten und Bewuchstypen vor, so können eine oder mehrere zusätzliche Bewuchsschichten eingeführt werden (z.B. Yamada, 1982; Groß, 1987). Derartige Modelle ermöglichen es, Abschattungseffekte und damit verbundene Temperaturunterschiede innerhalb der Vegetation zu berücksichtigen.

Neben der Bodentemperatur kann sich auch die Bodenfeuchte im Tagesverlauf ändern. Eine mögliche Bilanz hierfür lautet (Deardorff, 1978):

$$\bar{q}_{1o}^1 = \alpha_q \cdot \bar{q}_{1\text{sat}}^1(\bar{T}_o) + (1 - \alpha_q) \cdot \bar{q}_1^1 \quad (\text{erster Modellgitterpunkt})$$

$$\bar{q}_{1o}^1 \leq \bar{q}_{1\text{sat}}^1(\bar{T}_o) \quad (2-82)$$

Dabei hängt der Sättigungsgrad α_q vom aktuellen (W_s [m]) und möglichen (W_k [m]) Wassergehalt des Bodens ab. α_q läßt sich berechnen als:

$$\frac{\partial \alpha_q}{\partial t} = \frac{Q_L / l_{12} + P}{\rho_w W_k} \quad \text{mit } \alpha_q \leq 1 \quad (2-83)$$

Q_L bezeichnet wieder den latenten Wärmefluß, l_{12} die latente Wärme bei Kondensation, P den Niederschlag und ρ_w die Dichte des Wassers. Auch die Feuchteberechnung am Boden kann um eine oder mehrere Bewuchsschichten erweitert werden.

Werden Wolken modelliert, so werden sowohl für das Wolkenwasser als auch für Regenwasser und Eisteilchen Randbedingungen benötigt. Für Wolkentropfen, denen üblicherweise keine Sinkgeschwindigkeit zugeordnet wird, kann angenommen werden, daß bei einer am Boden aufliegenden Wolke der Boden bzw. Bewuchs auch befeuchtet wird. Wie groß der Effekt des "Auskämmens" auf den Wolkenwassergehalt ist hängt von der Art und Dichte des Bewuchses bzw. der Bebauung ab. Der Auskämmeffekt nimmt mit der Dichte der Hindernisse zu, die als Kondensationskerne wirken können (z.B. Nadelbäume mit vielen Kondensationskernen gegenüber Laubbäumen mit im Vergleich dazu ineffektiven Oberflächen). Gegenwärtig liegen aber noch nicht ausreichend viele Messungen vor, um einen allgemeingültigen Ansatz zu formulieren (vgl. Abschnitt 2.4.5.3). Als Randbedingung kann in einem hochauflösenden Regionalmodell

$$q_1^{2C} = q_1^{2C} \quad (\text{erster Gitterpunkt des Modells}) \quad (2-84)$$

verwendet werden, wodurch eine Totalreflexion der Wolkentropfen am Boden angenommen wird, oder die vollständige Aufnahme von Tröpfchen wird vorausgesetzt:

$$q_1^{2C} = 0 \quad (2-85)$$

Diese Randbedingung überschätzt die tatsächliche Reduktion des Wolkenwassergehaltes beim Aufliegen an Oberflächen. Beide Randbedingungen treffen die realen Bedingungen nicht, da die tatsächliche Impaktion von Wolkentropfen an Oberflächenhindernissen nicht beschrieben wird. Da für diesen Prozeß aber auch noch keine durch Messungen abgesicherte Parametrisierung vorliegt, die in hochauflösenden Regionalmodellen nutzbar ist, werden vereinfachende Randbedingungen verwendet.

Regen- und Eisteilchen kann eine Sinkgeschwindigkeit v_{TR} zugeordnet werden, wodurch die Randbedingung am Boden z.B. für Regentropfen folgende Form erhält:

$$\overline{w'q_1^{2R}} \Big|_s = v_{TR} q_1^{2R} \quad (\text{erster Modellgitterpunkt}) \quad (2-86)$$

Analog zu Gleichung (2-86) wird auch die Randbedingung für Schadstoffe am Boden festgelegt, wobei die Depositionsgeschwindigkeit v_D wie in Abschnitt (2.4.5.1) beschrieben berechnet wird.

Die Randwerte für die in diesem Abschnitt nicht aufgeführten Flüsse werden unter Berücksichtigung der verwendeten Parametrisierungen (Abschnitt 2.4) festgelegt.

2.6 Anfangswerte

Zur vollständigen Bestimmung des Differentialgleichungssystems (2-10) bis (2-15) werden neben den Randwerten auch Anfangswerte benötigt. Diese müssen für alle prognostischen Größen und für den Grundzustand vorgegeben werden.

Der Grundzustand wird über den geostrophischen Wind bzw. das großskalige Druck-, Temperatur- und Feuchtefeld charakterisiert. In den meisten hochauflösenden Regionalmodellen wird er stationär und horizontal homogen als Profil vorgegeben und entspricht der großräumigen meteorologischen Situation. Das räumliche Integrationsgebiet in Gleichung (2-17) umfaßt dann horizontal das Modellgebiet und vertikal die Vertikalgitterweite des Modells. Zeitlich ist der Grundzustand in diesem Fall für die gesamte Vorhersagezeit konstant. Wird genestet gerechnet (vgl. Abschnitt 2.5.1), so entspricht das räumliche Integrationsgebiet des Grundzustandes dem Gittervolumen des forcierenden großskaligen Modells. Die zeitliche Integration korrespondiert mit dem Zeitintervall, in dem neue großskalige Werte vorliegen. Dadurch ändert sich der Grundzustand des hochauflösenden Regionalmodells während der Vorhersage. Alternativ kann der Grundzustand auch anhand der Ergebnisse des gröber auflösenden Modells zeitlich unverändert vorgegeben werden.

Die Anfangswerte werden in Modellen der Mesoskala- α häufig über Analyseverfahren aus Daten meteorologischer Meßnetze berechnet (z.B. Grell et al., 1993). Mit diesen werden die Modellrechnungen gestartet. In Modellen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ werden solche Verfahren gelegentlich auch benutzt (z.B. Adrian und Fiedler, 1991). Meistens werden als Anfangswerte aber nur Messungen einer Station verwendet, und das Modell wird mit Hilfe der Diastrophie-Methode* initialisiert (z.B. Pielke, 1984; Groß, 1989; Niemeier und Schlünzen, 1993). Die Anfangswerte können auch aus einem gröberskaligen Modell abgeleitet werden (z.B. Adrian, 1985; Schatzmann und Schlünzen, 1995).

* Unter Diastrophie-Methode wird in hochauflösenden Regionalmodellen das langsame Anwachsen der Orographie verstanden, wobei während des Aufwachsens das gesamte Differentialgleichungssystem ohne Zusatzterme gelöst wird.

Mit den auf unterschiedliche Weise berechneten Anfangswerten werden die Modelle dynamisch initialisiert. Die Vorhersage ist in den ersten Stunden mit Störungen behaftet, deren Amplitude aber mit zunehmender Vorhersagezeit abnimmt. Meist wird davon ausgegangen, daß die Modellergebnisse nach etwa 3 Stunden von den Störungen durch nicht angepaßte Anfangswerte unabhängig sind. Eine Kontrolle hierüber ist allerdings nur schwer möglich. Sie kann evtl. anhand von Zeitserien an einem Kontrollpunkt erfolgen (vgl. Abschnitt 4.2.5).

Die Störungen in den Modellergebnissen, die durch nicht angepaßte Anfangswerte entstehen, können vermindert werden, indem die Anfangswerte möglichst passend zur Modellphysik bestimmt werden. Ideale Anfangswerte können auch über Variationsverfahren mit Hilfe des adjungierten Modellcodes gesucht werden (z.B. Kapitza, 1991). Diese Methode, die gegenwärtig an verschiedenen Institutionen erprobt wird, kann in wenigen Iterationsschritten zu angepaßten Anfangswerten führen (Kapitza, 1994, persönliche Mitteilung). Allerdings ist sie recht aufwendig zu realisieren, da neben dem eigentlichen Modell auch Ableitungen der diskretisierten Modellgleichungen nach den Variablen benötigt werden, die dem adjungierten Modellcode entsprechen. Durch die weiterhin notwendige Vorgabe der Randbedingungen nimmt deren Bedeutung für die Lösungsfindung zu. Bei falsch gewählten Randwerten könnten die dazu passend abgeleiteten Anfangswerte also ebenfalls falsch sein.

Die Anfangswerte müssen einerseits möglichst gut zur Modellphysik passen, um keine Störungen auszulösen, andererseits möglichst fehlerfrei sein, um realitätsnahe Modellergebnisse zu erhalten. Anhand einer Größenordnungsanalyse der Terme in den Bewegungsgleichungen kann mit Hilfe der Kennzahlen I_h und I_v (Gleichung 2-87) der Einfluß der Anfangswerte auf das entstehende Phänomen abgeschätzt werden (vgl. ANHANG E). Werden fehlerbehaftete Anfangswerte $U + \Delta U$, $dT + \Delta T$ betrachtet, so ergibt sich aus den Bewegungsgleichungen:

$$I_h = \frac{(1 + \Delta U/U)^2}{1 + \Delta T/\delta T} \cdot \frac{U^2}{R\delta T} \quad (2-87)$$

$$I_v = \frac{(1 + \Delta U/U)(1 + \Delta W/W)}{1 + \Delta T/\delta T} \cdot \frac{UW L_x}{R\delta T L_z}$$

Beträgt das Verhältnis von horizontaler bzw. vertikaler Advektion und der Beschleunigung aufgrund des horizontalen Druckgradienten etwa $I_h \cong I_v \cong 1$, so sind für die Ausprägung des Phänomens die Advektion und horizontale Druckgradienten gleich bedeutsam. Dieses wäre z.B. bei einer charakteristischen Geschwindigkeit U des Phänomens von etwa 17 m/s und einem horizontalen Temperaturgradienten δT von 1 °K der Fall, wenn beide Größen als fehlerfrei vorausgesetzt werden können ($\Delta U = \Delta T = 0$). Bei größeren Temperaturunterschieden oder geringeren Windge-

schwindigkeiten wird das entstehende Phänomen stärker vom Temperatur- als vom Windfeld beeinflusst. Diese Situation ist bei den meisten atmosphärischen Phänomenen gegeben (vgl. Tabelle E-1), sie werden im Validierungskonzept dem Bereich "Thermodynamik" zugeordnet. Phänomene, die bei $I_h, I_v \gg 1$ entstehen, werden dem Bereich "Dynamik" zugeordnet (vgl. Kapitel 4).

Bei gleich großen relativen Fehlern im Wind- und im Temperaturfeld beeinflussen nach Gleichung (2-87) Fehler im Windfeld die Lösung stärker als die Fehler im Temperaturfeld. Betrachten wir das oben aufgeführte Beispiel und nehmen wir einen Fehler von 10 % bei Geschwindigkeit und Temperatur an. In diesem Fall würde die dynamische Prägung des Phänomens intensiviert. Dabei ist der angenommene Fehler von 1.7 m/s im Windfeld durchaus realistisch, der Fehler im Temperaturfeld (0.1 °K) allerdings recht gering. Wäre dieser höher und betrüge z.B. 0.5 °K, so würde das entstehende Phänomen thermisch geprägt und es ergäbe sich eine andere Lösung.

Betrachten wir als zweites Beispiel eine Seewindzirkulation, die z.B. mit Ergebnissen eines grösser-skaligen Modells initialisiert wird. Die in den forcierenden Modellergebnissen enthaltenen Fehler in der Windgeschwindigkeit sollen 2 m/s (20 %) betragen, die Fehler in der Temperatur 0.5 °K (10 %). Das Phänomen wäre ohne Fehler thermisch geprägt (vgl. Tabelle E-1) und wird auch bei fehlerbehafteten Anfangswerten thermisch geprägt ($I_h = 4.2 \cdot 10^{-2}$, $I_v = 2 \cdot 10^{-2}$). Die angenommenen Fehler in den Anfangswerten können aber zu einer anderen Entwicklung der Seewindzirkulation führen und z.B. eine verminderte Inlandverlagerung der Front bewirken. Bei fehlerfreien Wind- und Temperaturwerten, aber einer falschen Windrichtung, könnten sich auch völlig andere Strukturen entwickeln. Derartige Fehler sind in der hier verwendeten einfachen Größenordnungsabschätzung nicht berücksichtigt. Sie kann nur als Anhaltspunkt für einen möglichen Einfluß von Fehlern in den Anfangswerten auf die Modellergebnisse dienen.

Die beiden Beispiele zeigen, daß bei fehlerbehafteten Anfangswerten die entstehenden Phänomene realitätsferne Strukturen aufweisen können. Relative Fehler im Wind wirken sich quadratisch, relative Fehler in der Temperatur linear auf die Art der Lösung aus. Insofern käme einer möglichst fehlerfreien Initialisierung des Windfeldes eine größere Bedeutung zu, als der fehlerfreien Temperaturinitialisierung. Dieses gilt aber nur, falls das zu simulierende Phänomen thermisch geprägt ist ($I_h, I_v \ll 1$). Gehört es zu den dynamisch bedingten Phänomenen, so hat eine genaue Temperaturinitialisierung große Bedeutung. In diesem Fall können bereits kleine Fehler im Temperaturfeld zur Entwicklung thermisch anstelle dynamisch geprägter atmosphärischer Phänomene im Modell führen. Aus diesem Grund sollte bei den Anfangswerten auf möglichst genaue Temperaturwerte und bei der Modellinitialisierung auf geringe Fehler in den horizontalen Temperaturgradienten geachtet werden.

2.7 Koordinatensysteme

Hochauflösende Regionalmodelle werden für die Simulation von Wind-, Temperatur- und Feuchtefeldern über beliebig gegliedertem Gelände genutzt. Zur Vereinfachung der unteren Randbedingung werden meist bodenangepaßte, sogenannte bodenfolgende Koordinatensysteme verwendet. Diese ermöglichen, über flachem wie über orographisch gegliedertem Gelände die unteren Randbedingungen des Modells auf gleiche Weise zu formulieren.

Kartesische Koordinaten können über Orographie unter Einschränkungen ebenfalls verwendet werden, wobei die Formulierung der unteren Randbedingungen aufwendiger als in den bodenfolgenden Koordinatensystemen ist. Im Bereich von Bergen kann zur Realisierung der Orographie eine unendlich große Zähigkeit angenommen werden (z.B. Mason und Sykes, 1978). Senkrechte Berghänge können mit dieser Methode gut berücksichtigt werden, beliebige Hangneigungen erfordern aber hohe vertikale und horizontale Gitterauflösungen im Bereich der Berge, wodurch die durch das kartesische Koordinatensystem bedingte ungenaue Wiedergabe der Orographie und die daraus folgende Verfälschung der Strömungsfelder vermindert werden können. Allerdings bleibt die Formulierung der unteren Randbedingung aufwendig. Modelle mit kartesischen Koordinaten sollten vor allem bei sehr steilem Gelände (Felskanten) oder für stadtklimatologische Studien (Straßenschluchten; z.B. Nicholls et al., 1994) benutzt werden.

Meist wird in hochauflösenden Regionalmodellen kein kartesisches, sondern ein bodenfolgendes Koordinatensystem verwendet, bei dem die Vertikalkoordinate folgende Form hat (z.B. Pielke, 1984):

$$\eta = z_t \frac{z - z_s}{z_t - z_s} \quad (2-88)$$

Am Boden folgt die Vertikalkoordinate der Topographiehöhe z_s , am Modelloberrand entspricht sie seiner Höhe z_t . Die Randbedingungen am Boden können in diesem Koordinatensystem wie über flachem Gelände formuliert werden. Allerdings muß das gesamte Differentialgleichungssystem transformiert werden, wie z.B. bei Schlünzen (1988) ausführlich beschrieben. Damit gewährleistet ist, daß das Modell auch über steilem Gelände verwendet werden kann, müssen alle Terme des Differentialgleichungssystems (2-1) bis (2-6) vollständig transformiert werden und Näherungen für flaches Gelände dürfen nicht erfolgen. Die mögliche Steilheit des Geländes hängt aber auch von den numerischen Verfahren ab und ist von Modell zu Modell durchaus unterschiedlich (Schlünzen, 1994a).

Auch bodenfolgende σ -Koordinaten werden in atmosphärischen Modellen häufig verwendet:

$$\sigma = \frac{p}{p_s} \quad (2-89)$$

Sie sind als Vertikalkoordinate gut geeignet, wenn die hydrostatische Approximation genutzt werden kann (vgl. Abschnitt 2.3.4). Dadurch besteht eine eindeutige Zuordnung zwischen der Höhe über Grund und dem Druck. Ist die hydrostatische Approximation nicht erfüllt, wie dieses für Phänomene der Mesoskala- γ häufig der Fall ist, so ist die Umrechnung nicht ohne zusätzliche Annahmen möglich (z.B. Grell et al., 1993). Daher sind η -Koordinaten für Modelle zur Simulation von Phänomenen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ besser geeignet.

Die Wahl des Koordinatensystems in horizontaler Richtung hängt von der beabsichtigten Größe des Simulationsgebietes ab. Für Gebiete der Mesoskala- β und Mesoskala- γ sind kartesische Koordinaten nutzbar, ohne zu große Fehler in Entfernungen oder Flächen durch die gewählte Projektion zu erhalten. Bei größeren Modellgebieten sollten geographische Koordinaten verwendet werden, um Projektionsfehler zu minimieren.

2.8 Diskretisierung und numerische Verfahren

Hochauflösende Regionalmodelle müssen im allgemeinen mit Hilfe numerischer Verfahren gelöst werden. Nur in Teilbereichen der Skala oder für bestimmte Phänomene können andere Lösungsmethoden verwendet werden.

Für die Simulation spezieller Phänomene der Mesoskala- γ und der Mikroskala (z.B. Gebäude- und Hindernisumströmungen) können z.B. physikalische Modelle genutzt werden (vgl. ANHANG F), mit denen meistens nur neutrale atmosphärische Schichtungen modelliert werden können. Für die Simulation von Phänomenen der Mesoskala- β sind physikalische Modelle weniger geeignet, so daß sie nicht allgemein als hochauflösende Regionalmodelle genutzt werden können (Schatzmann et al., 1986; Avissar et al., 1990).

Für einige Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ gibt es analytische Lösungen, wie in Abschnitt 3.3 erwähnt. Diese setzen aber linearisierte Gleichungen oder idealisierte Randbedingungen voraus. Damit sind sowohl physikalische Modelle als auch analytische Lösungen nur zur Wiedergabe einiger Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ geeignet.

Allgemeingültige Lösungen, wie sie bei Anwendungen eines hochauflösenden Regionalmodells auf reale Gegebenheiten erforderlich sind, können nur gefunden werden, wenn, wie in Modellen für andere Skalen, das gekoppelte nichtlineare Differentialgleichungssystem numerisch gelöst wird. Dabei werden die in den Abschnitten 2.5 und 2.6 beschriebenen Rand- und Anfangswerte berücksichtigt und eines der in Abschnitt 2.7 aufgeführten Koordinatensysteme gewählt.

Die numerische Lösung der Differentialgleichungen erfolgt in globalen Modellen häufig über spektrale Methoden. Für Modelle, die nur auf eine Region angewendet werden, bieten sich spektrale Methoden an, wenn zyklische Randbedingungen gewählt werden können. Die meisten Simulationen realer Situationen lassen eine derartige Annahme in Regionalmodellen nicht zu. Ein weiteres Problem bei spektralen Methoden besteht in der Wiedergabe der Topographie, die aufgrund der notwendigen wellenförmigen Darstellung mit zusätzlichen, künstlichen Maxima und Minima verbunden ist. Da topographische Effekte mesoskalige Phänomene stark beeinflussen und zudem zyklische Randbedingungen nicht genutzt werden können, werden spektrale Methoden in hochauflösenden Regionalmodellen nicht verwendet.

Eine zweite Möglichkeit der Lösung der Differentialgleichungen besteht in der Nutzung der Methode der finiten Elemente (z.B. Koclas et al., 1986; Steppeler, 1987; Benoit et al., 1989; Côté et al., 1990). Sie hat den Vorteil, daß das Gitter vollständig den Hindernisstrukturen angepaßt werden kann. Entsprechende Modelle werden häufig auch in der Hydrodynamik verwendet. In atmosphärischen Modellen wird die Methode der finiten Elemente aufgrund des hohen Rechenaufwandes seltener genutzt. Mit einem regelmäßigen nicht äquidistanten Horizontalgitter und vertikaler σ -Koordinate werden die finite-Elemente Methoden aber im globalen Modell des Kanadischen Wetterdienstes eingesetzt (Côté et al., 1993).

In den meisten Regionalmodellen werden die Differentialgleichungen über die Methode der finiten Differenzen gelöst. Diese sind relativ einfach zu implementieren, wodurch die Fehlermöglichkeiten bei der Realisierung eines Modells verringert werden. In der Meteorologie werden unterschiedliche Differenzenverfahren genutzt, die hier im Einzelnen nicht beschrieben werden sollen. Numerische Methoden sind z.B. bei Roache (1982) zu finden. Dort sind auch mögliche Tests zur Stabilität und Konvergenz numerischer Verfahren aufgeführt (siehe hierzu auch Mesinger und Arakawa, 1976).

Eine Möglichkeit zur Kontrolle der Stabilität numerischer Verfahren ist die Beschränkung des Zeitschritts nach dem Courant-Friedrichs-Levy (CFL) Kriterium. Bei zeitlich expliziten numerischen Verfahren darf der Zeitschritt danach einen bestimmten Wert nicht überschreiten. Für die Advektion mit einer Geschwindigkeit u in x -Richtung muß z.B. gelten:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{u} \quad (2-90)$$

Für das nicht-lineare gekoppelte Differentialgleichungssystem ist die Zeitschrittkontrolle wesentlich komplexer, allgemeine Kriterien können für komplexe Gleichungssysteme und numerische Methoden nicht gegeben werden. Daher kann die Zeitschrittkontrolle bei einem numerischen Modell nur anhand der Modellergebnisse erfolgen. Fehler, die durch zu große Zeitschritte bedingt sind, schlagen sich meist in der räumlichen Struktur der Ergebnisse nieder. Weist z.B. ein Konzentrationsfeld räumliche Unstetigkeiten auf, die sich physikalisch nicht erklären lassen, so ist dieses ein Hinweis auf zu große Zeitschritte. Der maximale Zeitschritt eines Modells, in dem alle Terme mit dem gleichen Zeitschritt gelöst werden, muß unterhalb des Minimums der erlaubten Zeitschritte liegen, die bei unabhängiger Integration der einzelnen Terme des Differentialgleichungssystems möglich wären.

Allen finite-Differenzen-Verfahren ist gemeinsam, daß die Modellgleichungen nicht kontinuierlich, sondern nur für bestimmte Punkte im Zeit- und Ortsraum gelöst werden. Jeder einzelne Wert, der mit einem numerischen Modell vorhergesagt wird, ist repräsentativ für ein ihn umgebendes Volumen $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ während eines Zeitintervalls Δt . Oft wird bei der Diskretisierung angenommen, daß die Änderungen zwischen den Gitterpunkten linear sind. Mit dieser Annahme lassen sich an jedem Punkt des Modellgebietes linear interpoliert Werte aus Werten an den Gitterpunkten berechnen. Bei der Interpretation interpolierter Werte ist aber zu bedenken, daß durch die diskrete Darstellung nur Phänomene vorhergesagt werden können, die mindestens der doppelten Gitterweite des Modells entsprechen. In Hinblick auf die verwendeten Filter (Abschnitt 2.9), die effektiv kurze Wellen dämpfen, liegt die vorhersagbare minimale Phänomengröße oberhalb der dreifachen Gitterweite des Modells. Dabei ist vorausgesetzt, daß die Parametrisierungen den Einfluß der subskaligen Prozesse auf die vorhersagbaren Phänomene richtig erfassen, sonst ist die vorher-sagbare minimale Phänomengröße noch größer.

Die meisten Modelle werden auf sogenannten geschachtelten Gittern diskretisiert, die entsprechend der Art der Schachtelung bezeichnet werden (Mesinger und Arakawa, 1976). Am häufigsten wird ein Arakawa-C Gitter benutzt. Auf diesem werden die Komponenten des Windvektors räumlich gegen die skalaren Größen versetzt diskretisiert. Dieses Gitter ist vorteilhaft, da auf diese Weise die Diskretisierung der anelastischen Approximation und der Druckgradientkraft numerisch genauer erfolgen kann, als bei nicht geschachteltem Gitter, denn die Differenzen können aus direkt benachbarten Gitterpunkten ermittelt werden. Beim geschachtelten Gitter muß bedacht werden, daß der Rand des Modellgebietes für alle berechneten Größen am gleichen Ort liegen muß, d.h. er fällt z.B. mit Gitterpunkten zusammen, an denen die Komponenten des Windvektors definiert sind, an denen skalare Größen aber nicht berechnet werden (oder umgekehrt).

Wird das geschachtelte Gitter an den Rändern und insbesondere bei Festlegung und Diskretisierung der Randwerte nicht berücksichtigt, so sind die Modellgleichungen in Differenzenform nicht notwendigerweise erfüllt.

2.9 Filterung

Bei der Lösung der Modellgleichungen entstehen aufgrund nichtlinearer Wechselwirkungsprozesse kurze Wellen, deren Amplitude mit zunehmender Vorhersagezeit zunimmt (Haltiner und Williams, 1980). Dieser Prozeß findet sowohl bei Nutzung spektraler Methoden als auch bei Verwendung finiter Differenzen statt. Auch in der Natur existiert die Wellenwechselwirkung zwischen Phänomenen verschiedener Horizontalausdehnung, sie kann hier aber zur Bildung beliebig kleiner und in der Mikroskala- γ schließlich dissipierender Wirbel führen. In Modellen, die nur eine begrenzte Horizontalauflösung aufgrund der verwendeten Gitterweite besitzen, können beliebig kurze Wellen nicht gebildet werden. Der in der Natur stattfindenden Dissipation wird hier durch die physikalisch bedingte Diffusion, durch diffusive numerische Verfahren (z.B. Gegenstrom-Differenzen) oder durch Filter Rechnung getragen (vgl. ANHANG D).

Bei wenig diffusiven numerischen Verfahren (z.B. Smolarkiewicz und Clark, 1986) müssen meist Filter verwendet werden, um kurze Wellen zu dämpfen. Die Filter können dabei verschiedene Charakteristiken aufweisen (z.B. Shapiro, 1971) und selektiv auf kurze Wellen ausgerichtet sein oder auch längere Wellen noch stark dämpfen. Mit zunehmender Anzahl der bei der Filterung berücksichtigten Gitterpunkte werden die Filter immer selektiver und dämpfen schließlich fast nur noch $2\Delta x$ -Wellen. In Hinblick auf eine Beurteilung von Modellergebnissen läßt sich sagen, daß die Ergebnisse um so näher an der Realität liegen, je weniger Filterung oder eine über die physikalisch begründbare Diffusion hinausgehende Dämpfung erforderlich ist. Gleichzeitig muß im Modell aber dafür Sorge getragen werden, daß die kurzen Wellen nicht unrealistisch anwachsen.

3 Grundlegende Anwendungstests

Im vorherigen Kapitel sind die physikalischen und mathematischen Grundlagen von Regionalmodellen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ ausführlich erläutert worden. In diesem Kapitel werden typische Modellanwendungen vorgestellt, anhand derer ein Modell für die genannte Skala geprüft werden kann. Sie bilden, wie die Grundlagen in Kapitel 2, einen Teil des Validierungskonzeptes, das in Kapitel 4 erläutert wird (Abschnitt 4.2.4).

3.1 Bestimmung der Anwendungstests und Fehlergrenzen

Die hier ausgewählten Modellanwendungen sind von möglichst einfacher Struktur, um sie ohne zu großen Aufwand durchführen zu können und evtl. im Modell vorhandene Fehler nicht durch die Überlagerung verschiedener Prozesse zu überdecken. Daher werden keine Vergleiche von Modellergebnissen mit Messungen vorgeschlagen, für die viele Modellrechnungen erforderlich sind. Dazu zählen z.B. das Nachrechnen der bodennahen Windrose im Oberrheingraben (Wippermann und Groß, 1981) oder Vergleiche von statistischen Ergebnissen eines numerischen Modells mit nach der TA-Luft errechneten Konzentrationen (Thehos et al., 1994). Derartige Vergleiche sind zu aufwendig, um sie als einfachen Anwendungstest für ein hochauflösendes Regionalmodell heranziehen zu können.

Auf grundlegende Tests zur Prüfung der genutzten numerischen Verfahren (z.B. "Kegeltest" für die Advektion, vgl. Smolarkiewicz, 1983; 1984; Bott, 1989), der verwendeten Gitter (z.B. nicht äquidistantes Horizontalgitter, vgl. Schlünzen, 1988) oder der Randbedingungen (z.B. Nesting-Tests bei Clark und Hall, 1991) wird hier ebenfalls verzichtet. Sie sollten bei der Entwicklung eines Modells unbedingt durchgeführt werden, insbesondere wenn neue numerische Methoden oder ungewöhnliche Gitterstrukturen genutzt werden. Für die Überprüfung eines komplexen dreidimensionalen Modells bieten sich idealisierte Numeriktests nicht an, da das Modell dafür vereinfacht werden müsste. Die zum Modelltest herangezogenen Modellanwendungen sollen dagegen der Überprüfung des vollständigen dreidimensionalen Modells dienen. Angestrebt ist dabei kein Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher Modellversionen, sondern die Überprüfung einer bestimmten Modellkonfiguration in Hinblick auf typische Modellfehler (Prinzip der "Falsifikation", vgl. Popper, 1982).

Zur Prüfung eines hochauflösenden Regionalmodells sind beliebig viele Modellanwendungen denkbar. Dazu zählen Tests, die vor allem der Modellphysik gelten (z.B. Kontrolle der Periode der

Trägheitsschwingung; Ähnlichkeit der Windprofile, die bei verschiedenen geostrophischen Winden entstehen) und Tests, die eher die Qualität der numerischen Verfahren prüfen (z.B. Prüfung der Advektions- und Diffusionsterme in der Bilanzgleichung für skalare Größen durch Vorgabe konstanter Konzentrationen über einem orographisch gegliederten Gelände, die auch nach mehrstündiger Integration des Modells konstant bleiben muß). Auf die Einbeziehung der genannten und weiterer Modellanwendungen ist hier verzichtet worden, um den Umfang der grundlegenden Anwendungstests in Grenzen zu halten.

Anstelle unzähliger Tests wird hier nur eine Auswahl vorgeschlagen. Die grundlegenden Anwendungstests sind so ausgewählt, daß möglichst viele Teile eines hochauflösenden Regionalmodells geprüft werden, indem atmosphärische Phänomene unterschiedlicher Ursache modelliert werden. Weiterhin sind die Anwendungen so gewählt, daß die Ergebnisse der Simulationen anhand von Plausibilitätsüberlegungen (Abschnitt 3.2), von analytischen Lösungen (Abschnitt 3.3), von Ergebnissen numerischer Modelle (Abschnitt 3.4) und von Messungen (Abschnitt 3.5) überprüft werden können. Für die einzelnen Anwendungstests werden dabei Fehlergrenzen angegeben, die ein validiertes Modell nicht überschreiten darf. Die für die Bewertung der Modellergebnisse genutzten Vergleichszahlen sind in ANHANG G zusammengefaßt.

Die Fehlergrenzen sind in Hinblick auf die Genauigkeit meteorologischer Routinemessungen* (Windbetrag: 0.5 m/s, bis zu 10 % des Meßwertes; Windrichtung: etwa 5°; Temperatur: 0.1 °K bis 1 °K (je nach Belüftung); relative Feuchte: 10 % des Meßwertes), aus Erfahrungswerten und über Plausibilitätsüberlegungen festgelegt worden. Letztere führen z.B. auf eine Fehlergrenze von 10^2 -Rechnergenauigkeit (Größenordnung der betrachteten Größe) für Größen, die sich aus physikalischen und mathematischen Gründen nicht ändern dürften, aber aufgrund der Rechnergenauigkeit† und somit aus numerischen Gründen geringe Änderungen erfahren können.

Die geringsten Fehler müssen bei den Anwendungstests entstehen, deren Richtigkeit über Plausibilitätsüberlegungen geprüft wird. Diese Modellanwendungen sind in Hinblick auf eine einfache Fehlerkontrolle konzipiert worden. Hier können maximale Abweichungen D_{\max} erwartet werden, die ein Vielfaches der Rechnergenauigkeit nicht überschreiten dürfen.

Bei Vergleichen zu analytischen Lösungen, anderen Modellergebnissen und Messungen sind die Fehlergrenzen weniger leicht vorgebar. Hier muß auch auf eine Vergleichbarkeit mit den

* Angaben nach Gert König-Langloh, 1993, persönliche Mitteilung.

† Die Rechnergenauigkeit liegt bei 32-bit Maschinen, d.h. bei den gegenwärtig gebräuchlichen PC's und Workstations, meist bei 6 Ziffern bzw. bei 64-bit Maschinen meist bei 14 Ziffern. Damit ist die Zahl 1 auf 10^6 bzw. 10^{14} genau.

Modellergebnissen geachtet werden, die gegebenenfalls zeitliche und räumliche Mittelungen oder eine Filterung erforderlich macht (vgl. Abschnitt 3.5).

Mit Hilfe des Korrelationskoeffizienten R_{OP} als Fehlermaß können Strukturvergleiche vorgenommen werden. Dabei wird davon ausgegangen, daß trotz unterschiedlicher räumlicher/zeitlicher Repräsentativität von analytischen Lösungen bzw. Messungen und Modellergebnissen die Übereinstimmung der Strukturen größer ist, als die einzelner Werte. Meist wird ein Korrelationskoeffizient von mehr als $R_{OP} = 0.9$ gefordert.

Auch maximale Abweichungen können für den Vergleich der Modellergebnisse mit analytischen Lösungen herangezogen werden, sie entsprechen dann der typischen Meßgenauigkeit der Größe. Für Vergleiche mit Messungen, die selbst fehlerbehaftet sind, bieten sich maximale Abweichungen als Fehlermaße nicht an. Hierfür werden nur die mittleren Abweichungen herangezogen (\bar{D}). Bei den in Abschnitt 3.5 verwendeten Werten wird davon ausgegangen, daß die Meßfehler zufällig um den als fehlerfrei angenommenen wahren Meßwert verteilt sind und somit der Mittelwert der Messungen (\bar{O}) quasi fehlerfrei ist. Er soll vom Modell mit Meßgenauigkeit getroffen werden. Mit diesen Überlegungen folgt für die mittlere Abweichung \bar{D} , daß sie im Rahmen der Genauigkeit meteorologischer Routinemessungen bzw. der zum Vergleich herangezogenen Messungen liegen muß.

Die gewählten Anwendungstests sind teilweise auch zur Prüfung von Modellen geeignet, die in anderen Skalen genutzt werden (z.B. die Anwendungstests der Abschnitte 3.2, 3.3). In dieser Arbeit beziehen sich aber die vorgegebenen Eingangswerte und die zulässigen Fehler auf hochauflösende Regionalmodelle. Da diese Modelle nicht nur zur Simulation meteorologischer Phänomene, sondern zunehmend auch für Stofftransportrechnungen eingesetzt werden, sind auch für diesen Modellteil grundlegende Anwendungen aufgeführt. Sie können Fähigkeiten und Defizite bzgl. des Transportes passiver Stoffe aufzeigen, verdeutlichen aber mögliche Fehler bei der Modellierung chemischer Umsetzungen nicht. Diese können teilweise durch Nachrechnen von Smog-Kammer-Experimenten gefunden werden (z.B. Hess et al., 1992a, b, c). Auf entsprechende Vergleichsmöglichkeiten und die damit verbundenen Schwierigkeiten wird im Rahmen dieser Arbeit nicht eingegangen, hier werden nur passive Tracer betrachtet.

3.2 Plausibilitätsuntersuchungen

Mit einem Modell können verschiedene sehr einfache Simulationen durchgeführt werden, die dazu geeignet sind, Fehler in der Programmierung des Modells oder in den physikalischen und mathematischen Grundlagen zu finden. Die horizontale Ausdehnung des Modellgebietes sollte für diese Modellrechnungen gering sein, damit evtl. fehlerbehaftete Randwerte schon nach kurzer Vorhersagezeit die Lösung im Modellgebiet beeinflussen. Dadurch ist jede Modellrechnung gleichzeitig ein Test der seitlichen Randbedingungen. Vertikal sollte die Zahl der Gitterpunkte und deren Höhe so festgelegt werden, daß sie einer typischen Modellanwendung entsprechen. Die Gitter dürfen nicht speziell an die grundlegenden Anwendungstests angepaßt werden, damit die Ergebnisse dieser Modellanwendungen auf andere Modellrechnungen übertragbar sind.

3.2.1 Winddrehung in der Grenzschicht

Eine der grundlegenden Anforderungen an ein Modell besteht darin, daß die berechneten Vertikalprofile des Windes - bezogen auf eine Anströmrichtung - auf der Nord- und Südhalbkugel der Erde und bei Anströmung des Modellgebietes aus verschiedenen Richtungen gleiche Winddrehungen aufweisen. Die vorgegebene Meteorologie kann dabei sehr einfach sein, z.B. wie in Tabelle 3-1 vorgeschlagen.

Das Modell ist bezüglich dieser Modellanwendung verifiziert, wenn die Winddrehung in der Grenzschicht auf der Nordhalbkugel nach rechts und auf der Südhalbkugel im gleichen Winkel nach links erfolgt sowie die neutrale Schichtung erhalten bleibt. Bei Anströmung aus West, Nord und Süd kann das Modell als verifiziert betrachtet werden, wenn die auf die geostrophische Ost-Anströmung normierten Profile von Wind und Temperatur übereinstimmen. Als übereinstimmend werden die Modellergebnisse bezeichnet, wenn die Unterschiede im Betrag des Windes weniger als $D_{\max}(\text{Windbetrag}) = 0.01 \text{ m/s}$, in der auf die Ost-Anströmung normierten Windrichtung weniger als $D_{\max}(\text{Windrichtung}) = 0.1^\circ$ und in der Temperatur weniger als die 10^4 -fache Rechnergenauigkeit ($D_{\max}(\text{Temperatur}) = 10^2 \cdot \text{Rechnergenauigkeit} \cdot 100 \text{ [K]}$) betragen.

Eingangsgröße	Wert
großskaliger Wind	5 m/s aus Ost
Schichtung	neutral
Bodentemperatur	288.16 °K, zeitlich konstant
relative Feuchte	keine
Bodendruck	1013.25 hPa
Rauhigkeitslänge	0.10 m
geographische Breite	50 ° (Nord oder Süd)
horizontale Gitterweite	2000 m
Gebietsgröße (horizontal)	-4 km bis 4 km, -4 km bis 4 km (4x4 Gitterpunkte)
vertikale Gitterweite	20 m bis 1000 m, nicht äquidistant
Modellberrand	8 km
Vorhersagezeit	6 Stunden
Kontrollausgabe	alle 3 Stunden

Tabelle 3-1 Eingangswerte für eine Grenzschichtsimulation auf der Nord- und Südhalbkugel.

Die Fehlergrenzen liegen für den Wind oberhalb der Rechnergenauigkeit, da die Windscherung bei neutraler Schichtung maßgeblich den Diffusionskoeffizienten für Impuls bestimmt und damit eine direkte Rückkopplung mit dem Windfeld gegeben ist.

3.2.2 Unterschiedliche Quellstärken

Wie erwähnt bezieht sich das in dieser Arbeit entwickelte Validierungskonzept auf Regionalmodelle, in denen nur passive Tracer transportiert werden. In diesem Fall hängt die Konzentration eines Stoffes linear von der Emissionsrate ab, solange keine impulsbehafteten Emissionen modelliert werden und nur eine einzelne Quelle betrachtet wird bzw. alle Emissionen mit gleichen Faktoren erhöht oder vermindert werden. Ein validiertes Modell muß den linearen Zusammenhang von Emissionsrate und Konzentration reproduzieren.

Die Modellrechnung kann wieder entsprechend Tabelle 3-1 initialisiert werden (Nord- oder Südhalbkugel), wobei am Koordinatenursprung in 50 m Höhe eine Quelle mit $Q_{S1} = 0.001$ kg/s bzw. $Q_{S2} = 0.1$ kg/s vorgegeben wird. In einem Modell müssen die mit der Quellrate normierten Konzentrationen (C_1/Q_{S1} und C_2/Q_{S2}) gleich sein, d.h. weniger als $D_{\max}(\text{normierte Konzentration}) = 10^2 \cdot \text{Rechnergenauigkeit} \cdot C_1/Q_{S1}$ voneinander abweichen.

3.3 Vergleich mit analytischen Lösungen

Analytische Lösungen existieren für das gekoppelte nichtlineare Differentialgleichungssystem (2-10) bis (2-15) bei beliebigen Rand- und Anfangswerten nicht. Nur für vereinfachte, meist linearisierte Gleichungssysteme lassen sich derartige Lösungen finden. Diese sind zur Wiedergabe beliebiger mesoskaliger Phänomene nicht geeignet, sie beschreiben ein bestimmtes Phänomen in genäherter Form. Oft werden sie zum Vergleich mit Ergebnissen komplexer nichtlinearer Modelle herangezogen (z.B. Lilly und Klemp, 1979; Kapitza, 1987; Schumann et al., 1987; Schlünzen, 1988; Kerkmann, 1990; Clark und Hall, 1991; Dudhia, 1993; Adrian, 1994; Finkele, 1994). Dabei gibt es entweder die Möglichkeit, das dreidimensionale numerische Modell so zu vereinfachen, daß die Gleichungen denen entsprechen, für die die analytische Lösung entwickelt wurde, oder die analytischen Lösungen werden zur Klassierung von Phänomenen genutzt, die mit dem vollständigen dreidimensionalen Modell errechnet werden. In Hinblick auf eine Prüfung des vollständigen Modells werden die analytischen Lösungen in dieser Arbeit zur Klassierung der Modellergebnisse genutzt. Dazu werden die Eingangswerte der Anwendungstests so festgelegt, daß die zu erwartende Lösung in eine bestimmte Klasse analytischer Lösungen fällt (z.B. Bergüberströmung bei neutraler / stabiler Schichtung), ohne mit dieser exakt übereinzustimmen. Aus diesem Grund liegen die für quantitative Vergleiche zulässigen Abweichungen deutlich oberhalb der in Abschnitt 3.2 angegebenen Werte.

3.3.1 Bergüberströmungen

Während die Anwendungstests in Abschnitt 3.2 sich auf flaches Gelände bezogen, wird nachfolgend eine Bergüberströmung betrachtet. Die hierfür durchzuführenden Modellrechnungen sind geeignet, die untere und obere Randbedingung eines Modells sowie die Berücksichtigung der Orographie im Modell zu prüfen.

Bei einer Bergüberströmung können in Abhängigkeit von der Scheitelhöhe L_{zb} des Berges und seiner Halbwertsbreite L_{xb} verschiedene Strömungsmuster entstehen, deren Art auch von der Wellenlänge $\lambda_s = U/N$ der Auftriebsbewegung und der Wellenlänge $\lambda_f = U/|f|$ der Trägheitsschwingung abhängt (z.B. Queney, 1947). Zur Klassierung der an einem Berg ausgelösten Wellen kann dabei gut die Froudezahl $Fr_d = \lambda_s / L_{xb}$ verwendet werden (z.B. Stull, 1988; Adrian, 1995). Bei sehr geringen Froudezahlen wird ein Hindernis umströmt, bei sehr großen Froudezahlen wird es wie bei neutraler Schichtung überströmt (siehe ANHANG F).

Long (1953) hat aus den Bewegungsgleichungen, der Kontinuitätsgleichung und dem 1. Hauptsatz eine Helmholtz-Gleichung abgeleitet, für die analytische Lösungen gefunden werden können. Dabei müssen die Stationarität und Inkompressibilität der Strömung, Hydrostasie und Turbulenzfreiheit sowie ein höhenkonstanter mittlerer Wind und Temperaturgradient vorausgesetzt werden; die Corioliskraft wird vernachlässigt. Eine genaue Ableitung der analytischen Lösung des Long-Problems, wie sie nachfolgend verwendet wird, kann bei Lilly und Klemp (1979) für eine zweidimensionale Bergüberströmung gefunden werden. Dort wird u.a. ein glockenförmiger Bergrücken folgender Form überströmt:

$$z_s(x) = L_{zb} \frac{L_{xb}^2}{L_{xb}^2 + x^2} \quad (3-1)$$

Nach Lilly und Klemp (1979) ist die Stromlinienverschiebung $\delta(x,z) = z(\text{gestörter Zustand}) - z(\text{Ungestörter Zustand, ohne Berg})$ gegeben als:

$$\delta(x,z) = z_s \cdot \cos\left(\frac{N}{U}(z - z_s)\right) + f_2(x) \cdot \sin\left(\frac{N}{U}(z - z_s)\right) \quad (3-2)$$

mit $f_2(x) = -\frac{x}{L_{xb}} z_s$

Als Lösung für das Temperaturfeld ergibt sich (vgl. Schumann et al., 1987):

$$\theta = \theta_o \left(1 + \frac{N^2(z - \delta)}{g}\right) \quad \theta_o: \text{Temperatur in Höhe } z_s \text{ (hier } 290 \text{ °K)} \quad (3-3)$$

Für das Windfeld folgt:

$$u = U \left(1 - \frac{\partial \delta}{\partial z}\right) \quad (3-4)$$

$$w = U \frac{\partial \delta}{\partial x} \quad (3-5)$$

Die aufgeführten Annahmen, die der Lösung (3-2) bis (3-5) zu Grunde liegen, zeigen, daß die Lösung nicht direkt mit den Ergebnissen eines nichtlinearen dreidimensionalen Modells verglichen werden kann. Damit ein direkter Vergleich möglich wäre, müßte die analytische Lösung räumlich so integriert werden, daß die Werte für die Gittervolumina des Modells repräsentativ sind, und die

Modellstruktur müßte weitgehend die Voraussetzungen der analytischen Lösung erfüllen. Zur Vereinfachung wird auf die räumliche Integration der analytischen Lösung verzichtet. Dadurch wird implizit ein linearer Verlauf der Lösung im Gittervolumen vorausgesetzt und nicht-lineare Verläufe, wie sie gerade bei Bergüberströmungen entstehen, werden nicht berücksichtigt. Die in Hinblick auf eine optimale Vergleichbarkeit zur analytischen Lösung erforderlichen Änderungen des Modells werden nicht vorgenommen, um nicht durch umfangreiche Anpassungen Fehler zu erzeugen oder wesentliche Teile des Modells dem Test zu entziehen. Damit die simulierte Situation den bei der Ableitung der analytischen Lösung vorausgesetzten Annahmen näher kommt, wird der Modellauf entsprechend Tabelle 3-2 initialisiert.

Eingangsgröße	Wert
großskaliger Wind	10 m/s aus West
Schichtung	stabil, 0.005 K/m
Bodentemperatur, bezogen auf NN	290 K, zeitlich konstant
relative Feuchte	keine
Bodendruck, bezogen auf NN	1000 hPa
Corioliskraft	30° N
Rauhigkeitslänge (geringe Bodenreibung)	0.0001 m
horizontale Gitterweite	1000 m
Gebietsgröße (horizontal)	-80 km bis 80 km, -2 km bis 2 km (160x4 Gitterpunkte)
vertikale Gitterweite	20 m bis 1000 m, nicht äquidistant
Modelloberrand	11 km
Orographie	nach Gleichung (3-1)
Scheitelhöhe des Berges (L_{zb} in Gl. (3-1))	300 m
Halbwertsbreite des Berges (L_{xb} in Gl. (3-1))	3000 m
Vorhersagezeit	9 Stunden
Kontrollausgabe	alle 3 Stunden

Tabelle 3-2 Eingangswerte für eine Bergüberströmung.

Abbildung 3-1 zeigt, für die in Tabelle 3-2 gegebene Modellkonfiguration, das Windfeld entsprechend der analytischen Lösung. Die Stützstellen sind dabei so gewählt, daß sie den Gitterpunkten in den Modellanwendungen zur "Überströmung eines Berges" in Abschnitt 5.2.4.1 entsprechen. Eine räumliche Integration der analytischen Lösung auf die Gittervolumina des Modells ist nicht erfolgt.

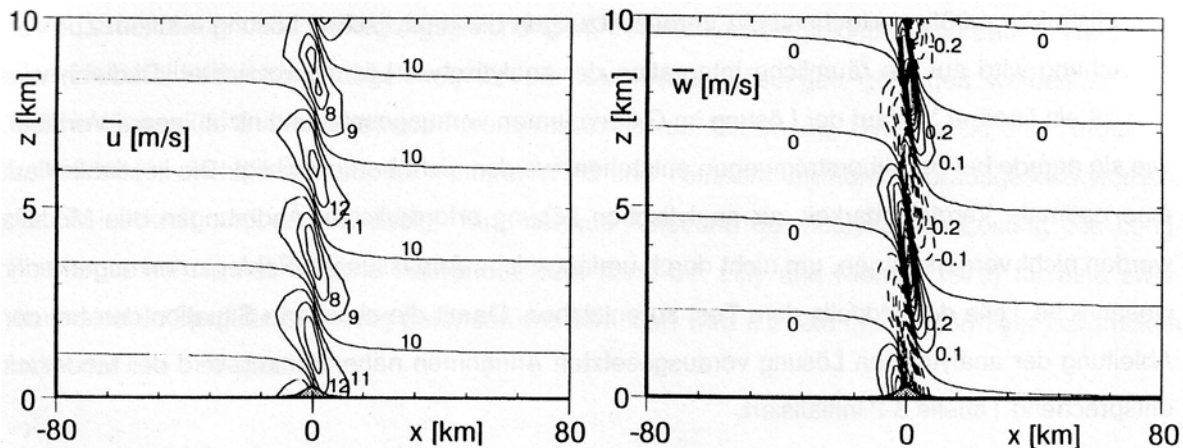


Abbildung 3-1 u-Komponente des Windes (links, Isolinienabstand 1 m/s) und Vertikalwind (rechts, Isolinienabstand 0.1 m/s), berechnet nach der analytischen Lösung (Gleichung 3-2 bis 3-5) für stabile Schichtung und einen geostrophischen Wind von 10 m/s an Stützstellen, die den Gitterpunkten der Modellanwendungen in Abschnitt 5.2.4.1 entsprechen.

Ergänzend zu der beschriebenen Bergüberströmung sollten Modellrechnungen mit vermindertem großskaligen Wind und für neutrale Schichtung durchgeführt werden. Bei vermindertem Windgeschwindigkeit ($U = 5 \text{ m/s}$) bilden sich bei stabiler Schichtung wie bei der höheren Windgeschwindigkeit Leewellen aus ($\lambda_s \ll L_{xb} \ll \lambda_f$), die aufgrund der halbierten großskaligen Windgeschwindigkeit eine halbierte Wellenlänge λ_b aufweisen. Abbildung 3-2 zeigt vergleichend die mit der analytischen Lösung berechneten Leewellen über dem Berg im Temperaturfeld bei $u = 10 \text{ m/s}$ und $u = 5 \text{ m/s}$.

Bei neutraler Schichtung ($N = 0$) geht für die in Tabelle 3-2 beschriebene Modellkonfiguration das Strömungsfeld in eine Potentialströmung über ($L_{xb} < \lambda_s$), da das Hindernis mit etwa 6° Maximalsteigung nur eine geringe Steigung aufweist. Eine Potentialströmung bildet sich bei der gewählten Topographieform (Gleichung 3-1) bis zu einer Steigung von etwa 30° aus (Hunt und Simpson, 1982). Bei größerer Steigung entsteht eine Rückströmung in Lee des Berges, und die Bergüberströmung wird asymmetrisch (z.B. Niemeier, 1992). Für die hier beschriebene Modellkonfiguration müssen sich symmetrisch zum Berg Auf- und Abwinde ausbilden, Leewellen entstehen nicht. Die analytische Lösung zeigt einen Aufwind in Luv und einen Abwind in Lee des Berges, die beide bei gleichbleibender Intensität bis zum Modelloberrand reichen, da bei der analytischen Lösung Hydrostasie vorausgesetzt wird.

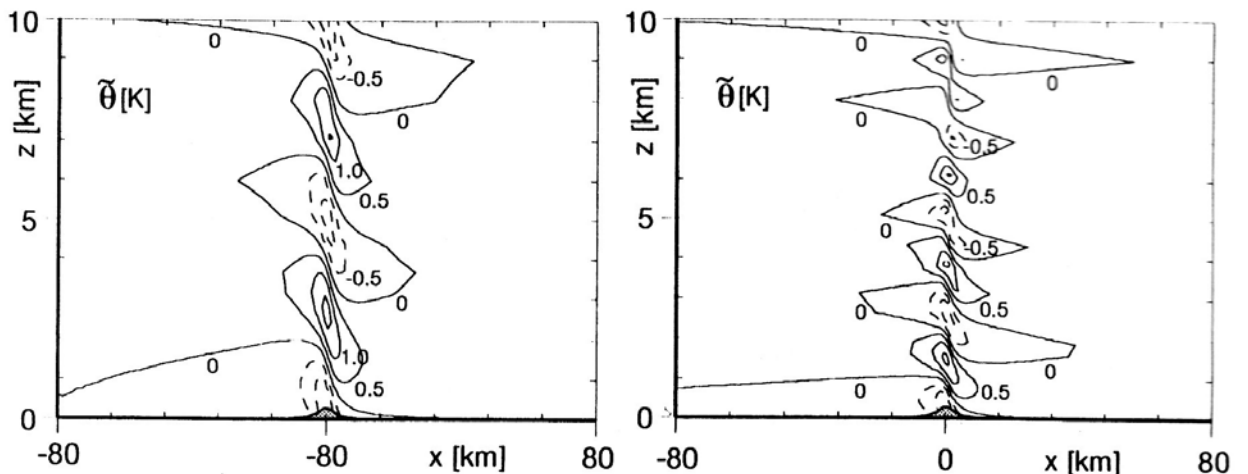


Abbildung 3-2 Störungen im Feld der potentiellen Temperatur bei einem mittleren Wind von $U = 10$ m/s (links) und von $U = 5$ m/s (rechts). Der Isolinienabstand beträgt jeweils 0.5°K , berechnet nach der analytischen Lösung (Gleichungen 3-2 bis 3-5) an Stützstellen, die den Gitterpunkten der Modellanwendungen in Abschnitt 5.2.4.1 entsprechen.

Das durch die Schichtung oder Windgeschwindigkeit bewirkte Überströmungsverhalten eines Berges muß ein Regionalmodell wiedergeben können, um als validiert gelten zu können. Dabei kann eine vollständige Übereinstimmung zwischen Modellergebnis und analytischer Lösung nicht erwartet werden. Aufgrund der turbulenten Transporte, die im Gegensatz zur analytischen Lösung in den Modellrechnungen berücksichtigt werden, und aufgrund anderer Randbedingungen* entstehen bei der numerischen Lösung größere Windgeschwindigkeits- und Temperaturänderungen in der bodennahen Grenzschicht als mit der analytischen Lösung berechnet werden. Zusätzlich wird die u -Komponente des Windes durch den Einfluß der Corioliskraft in der Grenzschicht vermindert. In größeren Höhen, in denen gegebenenfalls absorbierende Schichten wirksam sind, ist ebenfalls eine verminderte Amplitude der durch den überströmten Berg ausgelösten Störungen zu erwarten.

Die Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen des numerischen Modells und der analytischen Lösung kann daher bereits als gut bezeichnet werden, wenn die Strömungsmuster ähnlich sind. Dieses ist der Fall, wenn die modellierte Wellenlänge weniger als 25 % von der nach der analytischen Lösung möglichen Wellenlänge

$$\lambda_b = 2\pi\lambda_s = 2\pi U/N \quad (3-6)$$

* In der analytischen Lösung wird am Boden für den Wind freies Gleiten angenommen, im numerischen Modell die Haftbedingung. Die Bodentemperatur wird in Höhe z_s im numerischen Modell anhand des großskaligen Temperaturprofils festgelegt, in der analytischen Lösung entspricht die Bodentemperatur der Isentropenfläche 290°K .

abweicht. Zusätzlich müssen die Korrelationskoeffizienten für die Windgeschwindigkeit (u- und w-Komponente) und Temperatur mindestens $R_{OP}=0.9$ betragen. Für die Bewertung der Ergebnisse werden dabei nur Werte zwischen 1000 m und 6000 m (3-fache bis 20-fache Berghöhe) berücksichtigt. Die v-Komponente, die nach der analytischen Lösung Null sein müßte, sollte in diesem Höhenbereich gering sein, d.h. ihre Werte sollten mit $D_{\max}(v\text{-Komponente}) < 0.5$ [m/s] unterhalb der Genauigkeit meteorologischer Routinemessungen liegen.

3.3.2 Stofftransport bei verschiedenen atmosphärischen Schichtungen

Dieser Anwendungstest ist geeignet, die numerische Diffusion des vollständigen Modells zu prüfen und gravierende Fehler in der Turbulenzparametrisierung zu erkennen. Auch für ihn sollte das vollständige Modell verwendet werden, um Fehler im Modell auszuschließen, die erst durch die Modellanpassung entstehen.

Über horizontal homogenem Gelände läßt sich die Konzentration eines Stoffes in genügender Quellentfernung mit Hilfe eines Gaußmodells berechnen. Dieses ist eine analytische Lösung von Gleichung (2-12), wobei Stationarität, horizontale Homogenität, höhenkonstanter Wind* und höhenkonstante Diffusionskoeffizienten vorausgesetzt werden. Zusätzlich werden topographische Effekte vernachlässigt, das Koordinatensystem in Hauptwindrichtung gedreht, und angenommen, daß die longitudinale Advektion die Diffusion in diese Richtung übertrifft. Mit diesen Voraussetzungen ergibt sich für eine kontinuierliche Punktquelle in Höhe H bei Totalreflexion der Stoffe am Boden als analytische Lösung für die Konzentration C (z.B. Reuter und Cehak, 1966; McCormick und Gutsche, 1969; Pielke, 1984, Seite 135):

$$C(x, y, z) = \frac{Q_{sc}/\rho_0}{4\pi x \sqrt{K_{C22}K_{C33}}} \cdot \exp\left(-\frac{Uy^2}{4xK_{C22}}\right) \cdot \left\{ \exp\left(-\frac{U \cdot (z-H)^2}{4xK_{C33}}\right) + \exp\left(-\frac{U \cdot (z+H)^2}{4xK_{C33}}\right) \right\} \quad (3-7)$$

Üblicherweise wird das Gaußmodell mit Bezug auf die Standardabweichungen σ_2, σ_3 verwendet, die z.B. nach Pasquill und Smith (1983) abhängig von der Stabilität festgelegt werden. In dieser Form wird das Modell auch in der TA-Luft genutzt (Kalmbach und Schmölling, 1983) und ist für

* Durch die vorausgesetzten höhenkonstanten Werte für den Wind ist auch die Corioliskraft vernachlässigt.

einen Vergleich mit Ergebnissen eines Lagrange'schen Transportmodells geeignet. Für den Vergleich mit Ergebnissen eines Euler'schen Transportmodells, in dem nicht Standardabweichungen sondern Diffusionskoeffizienten verwendet werden, bietet sich dagegen Gleichung (3-7) an (Bigalke, 1991). Dabei existieren zwischen den Diffusionskoeffizienten K_{Cij} und den Standardabweichungen σ_i , die von der Quellentfernung abhängen, folgende Zusammenhänge (Pasquill und Smith, 1983):

$$\sigma_2^2 = 2xK_{C22}/U \quad \text{und} \quad \sigma_3^2 = 2xK_{C33}/U$$

Das Gaußmodell ist trotz seiner starken Vereinfachungen gegenüber der realen Atmosphäre zum Vergleich mit bestimmten Ergebnissen eines numerischen Modells geeignet. Untersucht werden kann beispielsweise, ob der numerisch modellierte Stofftransport zu diffusiv ist und vertikale Diffusion und horizontale Advektion im richtigen Verhältnis zueinander stehen. Dazu können z.B. die Korrelationskoeffizienten R_{OP} in Quellhöhe, 3-facher und 5-facher Quellhöhe betrachtet werden.

Der Vergleich der maximalen Konzentration

$$C_{\max} = \frac{2Q_s/\rho_0}{e\pi UH^2} \sqrt{\frac{K_{C33}}{K_{C22}}}$$

die am Boden an der Stelle

$$X(C_{\max}) = \frac{UH^2}{4K_{C33}}$$

auftritt, bietet sich nicht an, da sich durch die Gitterstruktur des numerischen Modells und die bodennahe Winddrehung sowohl eine andere bodennahe Konzentrationsverteilung als auch andere Werte für die Maximalkonzentration ergeben.

Die Eingangswerte für eine Modellkonfiguration, die für einen Vergleich der numerisch berechneten Konzentrationen mit denen des Gaußmodells geeignet ist, sind in Tabelle (3-3) zusammengestellt.

Eingangsgröße	Wert
	3 m/s aus West
Schichtung	neutral
Bodentemperatur	288.16 K
relative Feuchte	keine
Bodendruck (NN)	1013.25 hPa
Vorhersagezeit	6 Stunden
Rauhigkeitslänge	0.0001 m
geographische Breite	30° N
Emissionshöhe	150 m
Emittentenlage	Koordinatenursprung
Quellrate	0.1 kg/s
horizontale Gitterweite	500 m
Gebietsgröße (horizontal)	-12.5 km bis 12.5 km, -12.5 km bis 12.5 km (50x50 Gitterpunkte)
vertikale Gitterweite	20 m bis 1000 m, nicht äquidistant
Modelloberrand	8 km
Kontrollausgabe	alle 3 Stunden

Tabelle 3-3 Eingangswerte für eine Modellsimulation im Vergleich zum Gaußmodell.

Für den Vergleich von Modellergebnis und analytischer Lösung läßt sich der horizontale Diffusionskoeffizient K_{C22} , der in Gleichung (3-7) benötigt wird, nur schwer festlegen, da die Horizontal-diffusion im numerischen Modell durch die verwendeten numerischen Verfahren und Filter mitbestimmt und nicht nur über die Parametrisierung der turbulenten Prozesse festgelegt wird. Daher läßt er sich den Modellergebnissen nicht direkt entnehmen (vgl. ANHANG D). Da der Vergleich mit der analytischen Lösung aber vorgenommen wird, um den Einfluß der numerischen Diffusion abzuschätzen, braucht nur der physikalisch bedingte Diffusionskoeffizient berücksichtigt zu werden. Dieser kann den Modellergebnissen entnommen werden, falls er im Modell explizit berechnet wird (vgl. Abschnitt 2.4.1.5). Sonst sollte er zumindest gleich dem vertikalen Diffusionskoeffizienten K_{C33} gesetzt werden, auch wenn die dadurch vorausgesetzte isotrope Turbulenz tatsächlich erst für sehr kleine Wirbel erfüllt ist.

Für den Vergleich in Quellhöhe (150 m) werden die in diesem Niveau berechneten Diffusionskoeffizienten K_{C22} , K_{C33} horizontal gemittelt und in Gleichung (3-7) eingesetzt. Für den Vergleich in 450 m Höhe werden horizontal und über das Höhenintervall 150 bis 450 m Höhe vertikal gemittelte Diffusionskoeffizienten K_{C22} , K_{C33} herangezogen. Für den Vergleich in 750 m Höhe

werden auch die darüber befindlichen Diffusionskoeffizienten in die Ermittlung der repräsentativen K_{C22} , K_{C33} einbezogen.

Wie bei den Anwendungstests zur Bergüberströmung wird die analytische Lösung nur an den Gitterpunkten des Modells berechnet. Auf Basis dieser Werte werden die Korrelationskoeffizienten R_{OP} ermittelt, die oberhalb 0.8 liegen sollten. Eine räumliche Integration der analytischen Lösung und damit ein Bezug auf das Gittervolumen des Modells erfolgt nicht. Für die Korrelationskoeffizienten werden in diesem Anwendungsfall geringere Werte als beim Anwendungstest 3.2.1 verwendet, da die Winddrehung in der Grenzschicht die dreidimensionale Struktur der Konzentrationsfelder maßgeblich beeinflusst.

Neben dem Modellauf bei neutraler Schichtung sollten noch eine Simulation mit stabiler (0.005 K/m) und eine Simulation mit bodennah labiler (-0.005 K/m bis 500 m über Grund, darüber stabil mit 0.005 K/m) atmosphärischer Schichtung durchgeführt werden. Auch für diese Modellrechnungen sollten die Korrelationskoeffizienten oberhalb 0.8 liegen, wobei sie in den gleichen Höhen wie bei neutraler atmosphärischer Schichtung berechnet werden. Zusätzlich sollte aber auch die Vergrößerung (stabile Schichtung) bzw. Verminderung (labile Schichtung) von $x(C_{max})$ geprüft werden. Die Tendenzen müssen vom numerischen Modell richtig wiedergegeben werden können, damit es für diesen Anwendungstest verifiziert ist.

3.4 Vergleich mit Modellergebnissen

Modellergebnisse können auch mit den Ergebnissen anderer Modelle verglichen werden, wenn die Rand- und Anfangswerte der Modellrechnung sowie die Konfiguration des Modells, mit dem verglichen werden soll, genau bekannt sind (z.B. Groß und Etling, 1984; Schlünzen, 1988). Bei den meisten in Veröffentlichungen beschriebenen Modellergebnissen werden nicht alle für einen Modellauf notwendigen Parameter, sondern nur die dafür wesentlichen beschrieben. Letztere reichen nicht, um einen Ergebnisvergleich durchzuführen. Daher bietet es sich eher an, die Ergebnisse verschiedener Modellrechnungen, die mit dem zu validierenden Modell durchgeführt werden, untereinander zu vergleichen. Dabei sollten die Simulationen für meteorologische Bedingungen durchgeführt werden, für die die jeweiligen Ergebnisse qualitativ bekannt sind. Diese Vorgehensweise ist bereits in den Abschnitten 3.2 und 3.3 verfolgt worden, wobei die dort vorgestellten Anwendungen vor allem zur Überprüfung des dynamischen und des stoffdynamischen Teils des Modells geeignet sind. Die Anwendungen dieses Abschnittes beziehen thermodynamische Prozesse ein.

In Abschnitt 3.4.1 werden zunächst die Eingangswerte der Basissimulation und die zu erwartenden Ergebnisse vorgestellt. Der Abschnitt 3.4.2 bezieht sich auf diesen, wobei Veränderungen in Hinblick auf die im Modell zulässigen Prozesse vorgenommen werden.

3.4.1 Inlandverlagerung einer Seewindfront

Die Seewindzirkulation wird hier als Basissimulation für einen Vergleich mit anderen Ergebnissen eines zu validierenden hochauflösenden Regionalmodells gerechnet. Sie ist ausgewählt worden, da ihre Entwicklung qualitativ recht gut bekannt ist und sich die Ergebnisse der Basissimulation dadurch leichter beurteilen lassen (vgl. Atkinson, 1981). Gut untersucht ist z.B. die Position der Seewindfront und ihre Inlandverlagerung, die für realistische Anwendungen insofern bedeutsam ist, als die Seewindfront kontinentale und maritime Luftmassen trennt und somit wesentlich das Regionalklima beeinflusst.

Zur Beschreibung einer Seewindzirkulation gibt es analytische oder halb-analytische Modelle (z.B. Defant, 1950; Smith, 1955, 1957). Die Voraussetzungen, die beim Ableiten der Lösungen z.B. in Hinblick auf die vorgegebenen Temperaturverteilungen gemacht werden, sind aber zu einschränkend, als daß sich direkte Vergleiche von Ergebnissen eines hochauflösenden Regionalmodells mit den erwähnten Lösungen anbieten. Zur Beurteilung der Modellergebnisse können aber Messungen herangezogen werden, die z.B. an der südensüdküste durchgeführt wurden (Simpson et al., 1977). Aus den insgesamt ausgewerteten 76 Frontdurchgängen, die an verschiedenen Stationen registriert wurden, kann die mittlere Verlagerungsgeschwindigkeit der Front U_{front} abgeschätzt werden (Abbildung 1 bei Simpson et al., 1977). Die beobachteten Seewindfronten lagen um 12 Uhr etwa 10 ± 5 km, um 16 Uhr etwa 35 ± 15 km und um 20 Uhr etwa 70 ± 35 km landeinwärts, wobei der großskalige Wind als gering angegeben wird. Daraus ergibt sich von 12 bis 16 Uhr $U_{\text{front}} \approx 1.6 \pm 0.8$ m/s, darauf folgend bis 20 Uhr $U_{\text{front}} \approx 2.6 \pm 0.8$ m/s. Für die Schätzung um 20 Uhr konnten nur 36 Fronten herangezogen werden, da nur diese bis 70 km landeinwärts gelangten. In Hinblick auf eine Beurteilung der Modellergebnisse anhand der Messungen muß bei der Initialisierung des Modells darauf geachtet werden, daß sich eine intensive Seewindzirkulation bilden kann, bei der die Seewindfront möglichst weit landeinwärts gelangt. Dazu müssen die horizontalen Temperatur- und damit die mesoskaligen Druckgradienten den großskaligen Druckgradienten deutlich übertreffen.

Der Einfluß des geostrophischen Windes auf die Entwicklung der Seewindzirkulation ist in verschiedenen Arbeiten mit Modellen untersucht worden (z.B. Estoque, 1962; Physick, 1976; Savijärvi und Alestalo, 1988; Schlünzen und Krell, 1994). Aus diesen Modellergebnissen geht wie aus Messungen hervor, daß sich die Seewindfront um so weiter landeinwärts verlagert, je geringer der ablandige Wind ist (siehe auch Simpson et al., 1977; Atkinson, 1981). Aus den Modellergebnissen von Savijärvi und Alestalo (1988) ergibt sich eine den Messungen von Simpson et al. (1977) entsprechende Inlandverlagerung für einen ablandigen geostrophischen Wind zwischen 0.5 und 1 m/s. Für diesen Wert ist die von Schlünzen und Krell (1994) berechnete Inlandverlagerung geringer, wobei dort allerdings höhere Wassertemperaturen verwendet werden (15 °C, vgl. Schlünzen (1988), gegenüber 10 °C bei Savijärvi und Alestalo (1988)). Dadurch ist der das Zirkulationssystem antreibende mesoskalige Druckgradient bei Schlünzen und Krell (1994) geringer und die Seewindfront verbleibt küstennäher.

Die Initialisierungswerte für einen Modellauf zur Simulation einer Seewindzirkulation sind so gewählt, daß die Modellergebnisse möglichst gut mit den genannten Messungen verglichen werden können (Tabelle 3-4). Daher werden ein geringer ablandiger geostrophischer Wind (0.5 m/s) und eine Wassertemperatur von 12 °C vorgegeben. Für diese Modellrechnung muß das Modell so konfiguriert werden, daß Kondensation ausgeschlossen ist und Übersättigung zugelassen wird. Der Einfluß der Wolkenbildung auf die Modellergebnisse wird in der Modellanwendung 3.4.2 untersucht werden.

Eingangsgröße	Wert
geostrophischer Wind	0.5 m/s aus Nord
Schichtung	stabil, 0.0035 K/m
Boden- und Wasseroberflächentemperatur	Anfangswert (Mitternacht) 285 K, Rechnung mit Tagesgang für 21. Juni
relative Feuchte	80 % in Bodennähe, linear auf 5 % in 11 km Höhe abnehmend
Bodendruck (NN)	1013.25 hPa
Küstenlinie	West-Ost orientiert, Wasser im Süden
Rauhigkeitslänge über Land	0.10 m
Bodennutzung	niedrige Büsche
geographische Breite	51 ° Nord, 1 ° West
Charakteristiken zum Lösen der Gleichungen 2-80 bis 2-83: Albedo A thermische Diffusivität k_s thermische Leitfähigkeit v_s Eindringtiefe der Temperaturwelle h_θ Wasseranteil β , der von W_k aus dem Boden bzw. Bewuchs der Verdunstung zur Verfügung steht maximal möglicher Wassergehalt des Bodens bzw. Bewuchses	20 % $0.52 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ 1.33 J/(Ksm) 0.21 m 30 % 0.081 m
horizontale Gitterweite	2000 m
Gebietsgröße (horizontal)	-4 km bis 4 km, -80 km bis 80 km (4x80 Gitterpunkte)
vertikale Gitterweite	20 m bis 1000 m, nicht äquidistant
Modelloberrand	10 km
Modellstart	Mitternacht
Vorhersagezeit	20 Stunden
Kontrollausgabe	alle 4 Stunden

Tabelle 3-4 Eingangswerte für eine Seewindzirkulation.

Sowohl bei dieser Modellrechnung als auch bei der Seewindzirkulation, in der der Wolkeneinfluß berücksichtigt wird, ist eine vollständige Übereinstimmung von Modellergebnissen und Messungen nicht zu erwarten, da die Positionen der Seewindfront bei verschiedenen meteorologischen Bedingungen aus den Messungen bestimmt wurden. Die Modellergebnisse sollten aber der gewählten mittleren Situation entsprechen. Dabei ist zu beachten, daß in der Natur fast immer eine ausreichende Feuchte vorhanden ist, die Wolkenbildung zuläßt.

Die Übereinstimmung zwischen den Modellergebnissen ohne Wolkenbildung und den Messungen wird als gut angesehen, wenn die Verlagerungsgeschwindigkeit der Front am späten Nachmittag größer als am frühen Nachmittag ist. Die genaue Wiedergabe der aus den Messungen bestimmten Verlagerungsgeschwindigkeiten wird für diese Modellkonfiguration nicht erwartet. Die modellierte Position der Seewindfront sollte um 12 Uhr nicht mehr als 6 km (maximal 3 Gitterpunkte), um 16 Uhr nicht mehr als 16 km (maximal 8 Gitterpunkte) und um 20 Uhr nicht mehr als 36 km (maximal 18 Gitterpunkte) von der mittleren, aus Messungen bestimmten Position abweichen.

3.4.2 Seewindzirkulation mit Wolkeneinfluß

Bei der in Abschnitt 3.4.1 beschriebenen Seewindzirkulation werden Wolkeneffekte ausgeschlossen. Wolken können aber die Entwicklung der Seewindzirkulation und die Verlagerung der Front entscheidend beeinflussen. Tritt landeinwärts von der Front Kondensation und seewärts davon Verdunstung auf, beschleunigt die zusätzliche Wärmefreisetzung durch die Kondensationsprozesse die Inlandverlagerung der Front. Dieser Effekt ist durch Messungen (Simpson et al., 1977) und Modellergebnisse (van de Berg und Oerlemans, 1985; Schlünzen und Krell, 1994) belegt. Neben der bei Wolkenbildung erhöhten Verlagerungsgeschwindigkeit der Front sollte sich auch die simulierte Vertikalgeschwindigkeit erhöhen (Groß, 1986).

Der Einfluß der Wolkenbildung auf die Verlagerung und die Vertikalgeschwindigkeit der Seewindfront sollte untersucht werden, um den Einfluß von Wolken auf die simulierten atmosphärischen Zirkulationen zu prüfen. Die Modellrechnung wird entsprechend Tabelle 3-4 initialisiert, wobei nun das Modell so konfiguriert wird, daß auch die Wolkenbildung modelliert wird. Wandert die Seewindfront bei Wolkenbildung schneller landeinwärts und erhöht sich die Vertikalgeschwindigkeit in der Front, so erfaßt das hochauflösende Regionalmodell die Kondensationsprozesse und ihre Auswirkungen tendenziell richtig. Die Position der Seewindfront und die Verlagerungsgeschwindigkeit sollte im Rahmen der in Abschnitt 3.4.1 angegebenen Fehlerbereiche liegen und die Vertikalgeschwindigkeit die im Anwendungsbeispiel ohne Wolkenbildung übertreffen.

3.4.3 Konzentration und Deposition

Für diesen Anwendungstest wird Modellanwendung 3.4.2 gerechnet, wobei die Modellkonfiguration um zwei transportierte Stoffe erweitert wird. In der Simulation werden ein neutraler Tracer und z.B. SO_2 mit einer jeweils homogenen Anfangskonzentration von 10^{-9} kg/kg berücksichtigt. Der neutrale Tracer soll weder trocken noch naß deponiert werden, während bei SO_2 beide Depositionsprozesse berücksichtigt werden. Die Deposition, die die trockene oder durch Niederschläge bedingte Stoffablagerung am Boden wiedergibt, vermindert die Konzentration des deponierten Stoffes in der Atmosphäre. Dabei weist die trockene Deposition für viele Stoffe einen Tagesgang auf, da deren Ablagerung von der biologischen Aktivität der Pflanzen abhängt (vgl. Abschnitt 2.4.5.1). Die nasse Deposition hängt dagegen vor allem von der Lage und Intensität der Niederschlagsgebiete ab. Die Konzentration in der Atmosphäre muß für SO_2 , das mit Deposition gerechnet wird, geringer sein, als sie sich in der Modellrechnung für den neutralen Tracer (keine Depositionsprozesse) ergibt. Die mit dem Modell berechnete Depositionsgeschwindigkeit muß über Land für SO_2 tagsüber höher als nachts sein. Dabei ist zu beachten, daß SO_2 nachts höhere Depositionsgeschwindigkeiten aufweisen kann, wenn Taubildung einsetzt. Weiterhin muß die Konzentration von SO_2 im Bereich der Niederschläge gegenüber der des neutralen Tracers abnehmen, und die Naßdepositionsgebiete müssen mit den Niederschlagsgebieten korrespondieren.

Die aufgezeigten Abläufe werden vom Modell richtig erfaßt, wenn der Korrelationskoeffizient zwischen der Niederschlagsmenge und der naß deponierten Stoffmenge oberhalb $R_{F_R, F_W} = 0.9$ liegt. Gleichzeitig muß der Massenunterschied der Stoffe in der Atmosphäre

$$\sum_{i=1}^{\text{Zahl der Gitterpunkte}} (C(\text{neutraler Tracer}) - C(\text{SO}_2))_{i\text{-ter Gitterpunkt}} \cdot \text{Gittervolumen}_{i\text{-ter Gitterpunkt}}$$

unter Berücksichtigung der Flüsse über die offenen Ränder des Modells der insgesamt (naß und trocken) abgelagerten Menge ($\text{Masse} / \text{m}^2 \cdot \text{Gitterfläche}$) entsprechen. Die Mengen sollten nicht mehr als $10^2 \cdot \text{Rechnergenauigkeit} \cdot (\text{insgesamt abgelagerte Menge})$ voneinander abweichen. Die Modellierung zeigt, ob die Deposition und die resultierende Massenänderung im Modell konsistent berücksichtigt werden.

Die Modellrechnung, die hier beispielhaft für SO_2 aufgeführt ist, muß auch für die anderen im Modell betrachteten Stoffe durchgeführt werden, damit auch für diese die Depositionsmodelle validiert werden. Die Größenordnung der Depositionsgeschwindigkeit wird dabei ebensowenig wie die Abhängigkeit der Depositionsgeschwindigkeit von der Art des Bewuchses bzw. der Land-

nutzung (z.B. Wald, Wiese, Gebäude) geprüft. Beides muß in idealisierten Modellanwendungen untersucht werden (vgl. z.B. Pahl und Schlünzen, 1990).

3.5 Vergleich mit Messungen

Vergleiche mit Messungen bilden eine weitere Möglichkeit, die Güte von Modellergebnissen zu beurteilen. Hierbei entstehen ähnliche prinzipielle Probleme, wie bei einem Vergleich mit analytischen Lösungen oder einem Vergleich der Ergebnisse von Modellen unterschiedlicher Auflösung bzw. unterschiedlicher Modellphysik.

Die räumliche und zeitliche Repräsentativität eines Modellergebnisses hängt nicht nur von der gewählten Gitterweite und dem verwendeten Zeitschritt, sondern auch von den genutzten Parametrisierungen ab. Diese berücksichtigen nicht immer alle subskaligen Prozesse, oder die Parametrisierungen gehen von Mittelungsintervallen aus, die größer als der Zeitschritt des Modells sind. Dieses gilt beispielsweise für die aus Messungen abgeleiteten Turbulenzparametrisierungen, bei denen die mittleren subskaligen Flüsse meist aus über 10 bis 30 Minuten gemittelten Einzelmessungen abgeleitet wurden*. Die zeitlich im allgemeinen höhere Auflösung des Modells ist nur numerisch bedingt und erlaubt bei Nutzung üblicher Turbulenzparametrisierungen keine Aussagen über die mikroskalige Turbulenz. Kurzzeitigere Änderungen sind z.B. dann in den Modellergebnissen enthalten, wenn wolkenmikrophysikalische Prozesse parametrisiert sind. Diese Parametrisierungen basieren auf Messungen, die über kurze Zeitintervalle gemittelt wurden (einige 10 Sekunden; Doms und Herbert, 1985).

Aufgrund der unterschiedlichen Zeitskalen der verwendeten Parametrisierungen ist die zeitliche und räumliche Repräsentativität eines Modells nicht eindeutig festzulegen. Meist wird angenommen, daß die zeitliche und räumliche Auflösung durch den Zeitschritt und die Gitterweite des numerischen Modells charakterisiert werden können. Mit dieser Annahme sind dann bei einem Vergleich von Modellergebnissen untereinander die verschiedenen zeitlichen und räumlichen Auflösungen bekannt.

Auch die zeitliche und räumliche Repräsentativität von Messungen läßt sich nur unter Annahmen festlegen. Lediglich Laborexperimente (z.B. Messungen im Windkanal) können so durchgeführt werden, daß zumindest ihre zeitliche Repräsentativität durch verschieden lange Mittelungsinter-

* Ein Mittelungsintervall von 10 bis 30 Minuten entspricht nach der Taylor-Hypothese bei typischen atmosphärischen Windgeschwindigkeiten einer räumlichen Mittelung über 600 bis 6000 m (Busch, 1973).

valle ermittelt werden kann. Sie erlauben auch, räumlich aufgelöst atmosphärische Phänomene zu vermessen. Für ausgewählte Vergleiche mit Ergebnissen hochauflösender Regionalmodelle sind sie daher vor allem bei neutraler Schichtung gut geeignet (vgl. Abschnitt 2.8). Dokumentierte, allgemein verfügbare Datensätze gibt es gegenwärtig aber noch nicht.

Vergleiche von Modellergebnissen mit Messungen beziehen sich meist auf Naturmessungen. Beispielhaft werden hier Flugzeugmessungen betrachtet. Diese sind für Vergleiche mit Modellergebnissen besser geeignet als Punktmessungen, da mit ihnen der Wind und atmosphärische Zustandsgrößen wie z.B. auch mit Lidar-, Rass- und Sodarmessungen zumindest in bestimmten Gebieten dreidimensional erfaßt werden können. Allerdings überdecken auch diese Messungen keine vollständigen Gebiete, sondern liefern nur Informationen im Bereich der Flugstrecke (z.B. Schaller et al., 1995). Für einen Vergleich müssen die Modellergebnisse zu den Messungen passend ausgegeben werden, d.h. die Modellausgabe erfolgt entsprechend der Flugzeugposition und zeitabhängig. Dabei sind ggf. räumliche Interpolationen für eine den Meßorten entsprechende Ausgabe der Modellergebnisse erforderlich. Zum Vergleich liegen dann zwei Zeitserien vor, die unterschiedliche räumliche und zeitliche Skalen aufweisen.

Typische Skalen	Flugzeugmessungen *	Modellergebnisse
horizontal	2 m	horizontale Gitterweite
vertikal	2 m	vertikale Gitterweite
zeitlich	25 Hz	1 s bis einige min [†]

Tabelle 3-5 Typische räumliche und zeitliche Repräsentativität von Flugzeugmessungen und Modellergebnissen.

Für einen Vergleich von Messungen und Modellergebnissen müssen die in Tabelle 3-5 zusammengestellten unterschiedlichen Skalen auf gleiche Skalen überführt werden. Werden die Flugzeugmessungen über 500 Meßwerte gemittelt bzw. entsprechend der Modellgitterweite gefiltert, so haben sie horizontal die gleiche Auflösung wie die Modellergebnisse (hier angenommen zu 1000 m). Allerdings wird - je nach Flugmuster unterschiedlich - weder eine vertikale noch eine laterale Mittelung auf diese Weise erreicht. Sie wäre nur bei vertikalem und horizontalem Zickzackkurs des Flugzeuges möglich, oder die Auflösung des Modells müßte im Bereich der Flugzeugmessungen deutlich erhöht werden.

* Die Auflösung bezieht sich auf eine mit 25 Hz arbeitende Meßanlage, die von einem mit etwa 50 m/s fliegenden Flugzeug betrieben wird (Brümmer et al., 1990). Zusätzlich wird vorausgesetzt, daß sich alle Meßgeräte an der gleichen Stelle des Flugzeuges befinden.

† Die zeitliche Auflösung bezieht sich hier auf den numerisch bedingten Zeitschritt des Modells. Aufgrund der Gitterweite könnte bei Gültigkeit der Taylor-Hypothese die charakteristische Zeit des Modells bei horizontalen Gitterweiten von einigen Kilometern und Windgeschwindigkeiten von einigen m/s auch 10 Minuten betragen.

Durch die Mittelung der Messungen vermindert sich auch deren zeitliche Auflösung; sie beträgt für das genannte Beispiel nach der Mittelung etwa 20 Sekunden. Falls die zeitliche Auflösung des Modells größer ist, müssen die Modellergebnisse zeitlich gemittelt werden. Ist sie geringer, so sind zeitliche und evtl. räumliche Mittelungen der Messungen und Modellergebnisse erforderlich, bis beide gleiche Zeit- und Raumskalen aufweisen. Mit der Einschränkung unterschiedlicher vertikaler und lateraler Glättung können dann Meßwerte und Modellergebnisse verglichen werden (z.B. Schlünzen, 1992; Finkele, 1994).

Die für die Flugzeugmessungen aufgezeigten Probleme ergeben sich in ähnlicher Weise auch für andere Messungen. Daher ist keine vollständige Übereinstimmung von Modellergebnissen und Messungen zu erwarten. Die Übereinstimmung sollte aber zumindest im statistischen Mittel bestehen, falls genügend Messungen vorliegen. Dazu können als Vergleichszahlen z.B. Korrelationskoeffizienten oder mittlere quadratische Fehler betrachtet werden (vgl. ANHANG G).

Bei der Auswahl der in diesem Abschnitt herangezogenen Vergleichsdatensätzen wurde angestrebt, nur Datensätze zu berücksichtigen, die allgemein verfügbar sind, gute Qualität aufweisen und keine zu komplexen Modellanwendungen erfordern. Dadurch soll der mit der Validierung verbundene Aufwand gering bleiben. Leider gibt es derart aufbereitete, zum Vergleich mit hochauflösenden Regionalmodellen geeignete und allgemein zugängliche, vollständige Datensätze kaum. Ausnahmen bilden der häufig genutzte Wangara-Datensatz (Abschnitt 3.5.1) und Datensätze, die speziell für Vergleiche mit Regionalmodellen erstellt und genutzt wurden (z.B. Adrian und Fiedler, 1991; Mengelkamp, 1991; Groß, 1994). Als aktuelles Beispiel sei hier ein Datensatz des Experimentes PYREX erwähnt, das 1990 in den Pyrenäen stattfand (Bougeault et al., 1993). Der Datensatz ist sowohl zum Vergleich mit Ergebnissen eines Mesoskala- α -Modells, als auch eines Regionalmodells der Mesoskala- β geeignet, da er Daten für beide Modellauflösungen enthält. Dadurch ist er zusätzlich gut geeignet, genestete Modelle (vgl. Abschnitt 2.5.1) zu validieren. Der Datensatz wird gegenwärtig im Rahmen des COMPARE* Programms interessierten Gruppen zu Verfügung gestellt (Staniforth et al., 1994). Dabei ist, wie erwähnt, vor allem an eine Prüfung von Modellen der Mesoskala- α , Mesoskala- β gedacht. Zukünftige COMPARE-Datensätze sollen spezieller als der gegenwärtig vorliegende auch zum Vergleich mit hochauflösenden Regionalmodellen geeignet sein.

In Hinblick auf die Probleme, geeignete und allgemein verfügbare Datensätze zu finden und den großen Aufwand, der mit einer Vergleichsrechnung zu realen Daten verbunden ist, wird hier

* Comparison of mesoscale prediction and research experiments.

vorgeschlagen, für die Modellvalidierung Datensätze nachzurechnen, die in der jeweiligen Arbeitsgruppe bereits verfügbar sind. Dabei sollte es sich möglichst um Datensätze aus einem Gebiet handeln, für das weitere Modellanwendungen geplant sind, um den zusätzlichen Aufwand für die Modellvalidierung so gering wie möglich zu halten.

Damit die Bewertung der Ergebnisse nicht subjektiv erfolgt, werden auch für diese Vergleiche mit Messungen Fehlerbereiche angegeben (Tabelle 3-6). Wenn vorausgesetzt werden kann, daß die Meßfehler zufällig verteilt sind und die Messungen keinen systematischen Fehler aufweisen, sollte die mittlere Abweichung zwischen Messungen und Modellergebnissen unterhalb der Genauigkeit der mittleren Meßfehler liegen. Die gemessenen und modellierten Strukturen sollten zudem weitgehend übereinstimmen ($R_{OP} > 0.9$).

Vergleichsgröße	Abweichung der Mittelwerte \bar{D}	Korrelationskoeffizient R_{OP}
Windbetrag	0.5 m/s	> 0.9
Windrichtung	5 °	> 0.9
Temperatur	0.5 K	> 0.9
Feuchte	7 %	> 0.9

Tabelle 3-6 Fehlerbereiche für einen Vergleich von Modellergebnissen und Messungen. Als Basis wird für dieses Beispiel die Genauigkeit meteorologischer Routinemessungen herangezogen.

In den folgenden drei Abschnitten werden beispielhaft drei mögliche Datensätze aufgeführt. Die in Tabelle 3-6 angegebenen bzw. entsprechend der Genauigkeit der Messungen abgeleiteten Fehlerbereiche müssen bei den Vergleichsrechnungen eingehalten werden, damit ein Modell als validiert gelten kann.

3.5.1 Wangara-Daten

Das Wangara-Experiment fand 1967 in der Nähe von Hay (Australien) statt (Clarke et al., 1971). Der Datensatz, insbesondere die beiden Tage 33/34, ist ein häufig benutzter Vergleichsdatensatz für die Bewertung von Parametrisierungen der subskaligen turbulenten Diffusion (u.a. Wyngaard und Côté, 1974; Yamada und Mellor, 1975; André et al., 1978; Mahfouf, 1987). Das Wangara-Experiment ist eines von mehreren Grenzschichtexperimenten, die von 1962 bis 1976 in Australien durchgeführt wurden (Garratt und Hicks, 1990). Die kontinuierliche Nutzung des relativ alten

Datensatzes hat dazu beigetragen, daß er auch gegenwärtig noch verfügbar ist (Garratt, 1994, persönliche Mitteilung) und vollständig vorliegt, wobei einige Größen (z.B. Rauigkeitslänge, Bodenflüsse) nachträglich neu festgelegt wurden (Hicks, 1976; Hess et al., 1981; Hicks, 1981). Da die Profile über horizontal relativ homogenem Gelände gemessen wurden, reichen für Vergleiche im Prinzip eindimensionale Modellrechnungen. Wie bereits in Abschnitt 3.2 ausgeführt, sollte in Hinblick auf eine Validierung aber das vollständige dreidimensionale Modell verwendet werden, wobei die Gitterstruktur des Modells der in Tabelle 3-1 angegebenen entsprechen kann. Das Vertikalgitter sollte also mit der einer typischen Modellanwendung korrespondieren.

3.5.2 Flugzeugmessungen - Beispiel für einen dreidimensionalen Datensatz zur Validierung der Thermodynamik

Für den zweiten Vergleich mit Messungen sollte ein Datensatz herangezogen werden, der dreidimensional und hochauflösend meteorologische Größen auch oberhalb der atmosphärischen Grenzschicht erfaßt. Derartige Vergleiche sind sehr aufwendig, weshalb hier unbedingt ein in der jeweiligen Arbeitsgruppe vorliegender Datensatz verwendet werden sollte. Am Beispiel eines Flugzeugdatensatzes wird in diesem Abschnitt noch einmal der prinzipielle Weg vorgestellt.

Der hier betrachtete Flugzeugdatensatz wurde 1989 im Rahmen eines ZISCH-Experimentes über der Deutschen Bucht gewonnen (Schwikowski et al., 1991; Schlünzen, 1992; Schulz, 1993). Die großräumige meteorologische Situation wurde von einem Hoch über dem südlichen Skandinavien bestimmt, das bodennah zu einer süd-östlichen Strömung im Gebiet der Deutschen Bucht führte. Das Hochdruckgebiet veränderte seine Lage nur wenig, so daß die vergleichenden Modellrechnungen auch mit zeitlich festen und horizontal homogenen großräumigen meteorologischen Bedingungen durchgeführt werden können.

Die Flugzeugmessungen wurden am 23.5.89 Vor- und Nachmittags durchgeführt, um Veränderungen in der Grenzschichtstruktur im Laufe des Tages erfassen zu können. Die Messungen erfolgten bis in 3000 m Höhe und 300 km Küstenentfernung am Morgen (6:42 bis 7:42), Vormittag (9.30 bis 10.45) und Nachmittag (14.11 bis 17.31) des Meßtages mit den in Tabelle 3-5 aufgeführten Repräsentativitäten. Zusätzlich liegen Messungen von Radiosonden vor, die von Helgoland und dem Forschungsschiff Valdivia aus gestartet wurden (Falke et al., 1990). Daneben stehen die Routinedaten des Deutschen Wetterdienstes zur Verfügung und verschiedene weitere Messungen, die während des zur gleichen Zeit durchgeführten FRONTTEX-Experimentes erfolgten (siehe dazu: Brümmer, 1990).

Der großräumige Grundzustand kann z.B. aus den gemittelten Radiosondenprofilen der Stationen Helgoland und Schleswig abgeleitet werden. Damit ergibt sich in der Grenzschicht eine südöstliche Strömung, die in mittleren Höhen (2000 bis 6000 m) etwas südlicher und darüber mehr aus nördlicher Richtung kommt. Die Scherung im Windprofil und die nach oben hin zunehmende Varianz der meteorologischen Größen um das mittlere Profil weisen auf die trotz der relativ stationären Situation vorhandene räumliche Inhomogenität und Instationarität der meteorologischen Situation hin. Diese Abweichungen vom als horizontal homogen und stationär angenommenen Grundzustand sind aber gering genug, um sie in erster Näherung vernachlässigen zu können.

Sollen alle verfügbaren Flugzeugmessungen zum Vergleich mit Modellergebnissen herangezogen werden, so ist ein Modellgebiet von etwa $300 \times 300 \text{ km}^2$ erforderlich. Die horizontale Gitterweite des Modells muß dann oberhalb von 2 km, die vertikale Gitterweite um 100 m liegen, da sonst der Ressourcenverbrauch für die Modellrechnung zu hoch ist. Der Zeitschritt eines hochauflösenden Regionalmodells liegt für diese Gitterkonfiguration nachts bei etwa 1 Minute, tagsüber bei 10 Sekunden. Kurzzeitigere Fluktationen können mit dem Modell nicht berechnet werden. Daher ist die Vergleichbarkeit von Messungen und Modellergebnissen auch dann gegeben, wenn die Messungen auf 10 s Mittelwerte reduziert werden. Auf diese Weise können auch die Datenmengen und der rechnerische Aufwand für den Vergleich reduziert werden. Bei einer mittleren Flugzeuggeschwindigkeit von 50 m/s ergibt sich für 10 s Mittelwerte eine Horizontalauflösung in Flugrichtung von 500 m/s, der eine laterale und vertikale Auflösung von etwa 25 m gegenüberstehen.

Für den Vergleich mit Flugzeugmessungen müssen die Modellergebnisse an den Positionen des Flugzeuges ausgegeben werden, wobei aufgrund der Gitterstruktur des Modells räumliche Interpolationen erforderlich sind. Zu jedem Zeitpunkt bzw. alle 10 Sekunden liegen dann ein Meßwert und ein Modellergebnis vor, deren räumliche Repräsentativitäten verschieden sind. Mit Hilfe gleitender Mittel entsprechend der Gitterweite des Modells kann eine Vergleichbarkeit in Flugrichtung geschaffen werden. Die unterschiedlichen Repräsentativitäten in lateraler und vertikaler Richtung lassen sich dadurch aber nicht beseitigen. Aufgrund kleinräumiger, im Modell nicht erfaßter atmosphärischer Strukturen, können erhebliche mittlere Abweichungen entstehen. Sie könnten beispielsweise bei Messungen an der Inversion oder im Bereich der Wolkenbasis einige Kelvin betragen, ohne daß daraus auf fehlerhafte Modellergebnisse geschlossen werden kann. Sollten derartige Messungen in dem zum Vergleich herangezogenen dreidimensionalen Datensatz vorliegen, so sollte als Fehlermaß nicht die Abweichung der Mittelwerte (\bar{D}), sondern nur der Korrelationskoeffizient (R_{OP}) betrachtet werden, da davon ausgegangen werden kann, daß die Strukturen im Flugniveau auch in etwas größerer oder geringerer Höhe noch gefunden werden können und insofern auch im Modell enthalten sein müßten (siehe Tabelle 3-7).

Vergleichsgröße	mittlere Abweichung der Mittelwerte \bar{D}	Korrelationskoeffizient R_{OP}
Windbetrag	1.5 m/s	> 0.9
Windrichtung	5 °	> 0.9
Temperatur	0.5 K	> 0.9
relative Feuchte	5 %	> 0.9

Tabelle 3-7 Fehlerbereiche für einen Vergleich von Modellergebnissen mit Flugzeugmessungen (Beispiel: Fallstudie 23. Mai 1989).

Können systematische Abweichungen zwischen Messungen und Modellergebnissen aufgrund kleinräumiger atmosphärischer Strukturen ausgeschlossen werden, so können zur Festlegung der zulässigen Fehlerbereiche beim Vergleich von Modellergebnissen mit Flugzeugmessungen die Meßgenauigkeiten des Flugzeugs herangezogen werden (vgl. Brümmer et al., 1990). Damit ergeben sich für das hier gewählte Beispiel die in Tabelle 3-7 angegebenen Fehlerbereiche.

Analog zu dem aufgeführten Beispiel muß beim Vergleich mit anderen dreidimensionalen Datensätzen vorgegangen werden. Falls die Messungen nicht im Bereich ausgeprägter lateraler oder vertikaler Gradienten erfolgten, können sowohl die mittlere Abweichung (\bar{D}) als auch der Korrelationskoeffizient (R_{OP}) als Fehlermaße herangezogen werden. Sonst sollte nur R_{OP} betrachtet werden.

3.5.3 Ausbreitungsexperimente im Bereich der Sophienhöhe - Beispiel für einen dreidimensionalen Datensatz zur Validierung der Stoffdynamik

Zur Validierung des Ausbreitungsteils eines Modells sollte ein darauf besonders ausgerichteter Datensatz verwendet werden. Hier werden beispielhaft Ergebnisse der Ausbreitungsexperimente herangezogen, die von der KFA Jülich im Bereich der Sophienhöhe durchgeführt wurden (Zeuner und Heinemann, 1990; 1993). Diese oder frühere Messungen wurden bereits mehrfach mit Modellergebnissen verglichen (Groß et al.; 1987, Möllmann-Coers und Vogt, 1990; Neick, 1992) und sind geeignet, auch den Hinderniseinfluß auf die Stoffausbreitung zu prüfen.

Als Tracer wurde bei den Ausbreitungsexperimenten das inerte Gas SF_6 verwendet. Neben Konzentrationen wurden auch meteorologische Größen im Gebiet der Sophienhöhe und bis zu einigen

Kilometern Entfernung davon gemessen. Aus den 11 Experimenten, die 1988 und 1989 durchgeführt wurden, können Experimente ausgewählt werden, bei denen die großräumige meteorologische Situation relativ stationär war (z.B. 4. September 1988). Damit die Strömungsfelder im Bereich der Sophienhöhe, die etwa $4 \times 3 \text{ km}^2$ groß und 185 m hoch ist, realitätsnah modelliert werden können, sollte die Horizontalauflösung des Modells weniger als 100 m betragen.

Auch für diesen Anwendungstest werden die Fehlerbereiche spezifiziert. Aus der Beschreibung der Experimentdaten lassen sich etwa die in Tabelle 3-8 zusammengefaßten mittleren Abweichungen ableiten, wobei keine Unterscheidung hinsichtlich der unterschiedlichen Meßgeräte vorgenommen worden ist. Die mit verschiedenen Meßgeräten durchgeführten Messungen können daher genauer, im Einzelfall aber auch ungenauer sein. Speziell bei den Konzentrationsmessungen ist der Fehlerbereich sehr groß (Lyck et al., 1990).

Vergleichsgröße	Abweichung der Mittelwerte \bar{D}	Korrelationskoeffizient R_{OP}
Windbetrag	0.5 m/s	> 0.9
Windrichtung	10 °	> 0.9
Temperatur	0.3 K	> 0.9
relative Feuchte	5 %	> 0.9
Konzentration	20 %*	> 0.8†

Tabelle 3-8 Fehlerbereiche für einen Vergleich von Modellergebnissen mit Messungen im Gebiet der Sophienhöhe.

Auch für diesen Vergleich müssen die Modellergebnisse am Ort der Messungen ausgegeben werden. Zudem müssen die Modellergebnisse zeitlich gemittelt werden, um sie mit den Messungen vergleichen zu können.

* Dieser Fehler bezieht sich auf die mittlere Konzentration \overline{OP} , die als Mittelwert aus Meßdaten und Modellergebnissen berechnet wird: $\overline{OP} = 0.5 (\bar{O} + \bar{P})$.

† Aufgrund der Ungenauigkeit der Messungen und der ungleichmäßigen Fehlerverteilung (vgl. Lyck et al., 1990) kann für die Konzentrationsfelder nur eine schlechtere Übereinstimmung erwartet werden.

4 Validierungskonzept

In diesem Kapitel wird auf der Basis der zuvor vorgestellten Modellgrundlagen (Kapitel 2) und Modellanwendungen (Kapitel 3) ein mögliches Validierungskonzept für hochauflösende Regionalmodelle vorgestellt.

4.1 Struktur des Validierungskonzeptes

Das hier vorgeschlagene Validierungskonzept enthält qualitative und quantitative Kriterien. Diese sind so festgelegt, daß ein Modell in Hinblick auf die Realitätsnähe seiner Ergebnisse geprüft wird. Nach dem Validierungskonzept kann ein Modell als validiert gelten, wenn es die folgenden Kriterien erfüllt:

- Vollständigkeit:** die Modelleigenschaften müssen vollständig sein, d.h. sie müssen die Simulation der in der Skala auftretenden Phänomene ermöglichen.
- Nachvollziehbarkeit:** die Validierung muß für Außenstehende nachvollziehbar sein, das Modell und seine Validierung müssen also extern prüfbar sein.
- Realisierungsgüte:** die Modellrealisierung muß eine bestimmte Güte aufweisen, die anhand einzelner Prüfpunkte nachzuweisen ist.
- Ergebnisgüte:** die Güte der Modellergebnisse muß anhand ausgewählter Modellanwendungen belegt worden sein, d.h. mit dem Modell müssen bestimmte Anwendungstests im Rahmen vorgegebener Maximalfehler erfolgreich durchgeführt worden sein.
- Ergebniskontrolle:** für jede Modellrechnung muß erfolgreich eine Qualitätskontrolle der Ergebnisse durchgeführt werden.

Jedes der fünf Kriterien besteht aus mehreren Prüfpunkten, die in Abschnitt 4.2 aufgeführt werden.

Die Validierungskriterien "Nachvollziehbarkeit", "Realisierungsgüte" und "Ergebnisgüte" beinhalten die von Pielke (1984, Seite 421) zusammengestellten Ideen und spezifizieren sie in Hinblick auf ein Validierungskonzept, so daß Forderungen an Modelle entstehen. Die Prüfung der "Vollständigkeit" und die "Ergebniskontrolle" gehen über die von ihm vorgeschlagenen Prüfpunkte hinaus und

sind ein wesentlicher Schritt zu einem Validierungskonzept, das von der Vielfalt der möglichen Anwendungsfälle eines Modells weitestgehend unabhängig sein sollte.

Die aufgeführten fünf Validierungskriterien werden mehr oder minder bei allen Validierungen hochauflösender Regionalmodelle beachtet, jedoch individuell bewertet. Daher ist die Nachvollziehbarkeit der Validierung für Außenstehende ein wesentlicher Punkt des Konzeptes ("Nachvollziehbarkeit", Abschnitt 4.2.2). Zusätzlich muß die potentielle Anwendbarkeit des Modells auf die Phänomene der entsprechenden Skala geprüft werden ("Vollständigkeit", Abschnitt 4.2.1). Dieses eigentlich selbstverständliche Kriterium wird gelegentlich dann nicht beachtet, wenn ein Modell schon lange benutzt wird und die Modellgrundlagen inzwischen in den Hintergrund getreten sind. Da sich aufgrund neuerer wissenschaftlicher Erkenntnisse der wissenschaftlich anerkannte Gültigkeitsbereich von Parametrisierungen und Approximationen geändert haben kann (vgl. Abschnitte 2.3, 2.4), sollten auch die Modelleigenschaften regelmäßig auf ihre Zulässigkeit für die Simulation von Phänomenen einer bestimmten Skala geprüft werden. Analoges gilt für die Übereinstimmung von Modelleigenschaften und -realisierung, wobei hier insbesondere auf Fehler in der Modellrealisierung zu achten ist ("Realisierungsgüte", Abschnitt 4.2.3). Schließlich sollen die Ergebnisse der Modellanwendungen nur im Rahmen vorgegebener Abweichungen von analytischen Lösungen, Modellergebnissen und Messungen differieren ("Ergebnisgüte", Abschnitt 4.2.4). Die bereits genannten Kriterien erhöhen bei ihrer gleichzeitigen Beachtung die Wahrscheinlichkeit, daß ein Modell auf alle Phänomene der betrachteten Skala angewendet werden kann.

An dieser Stelle sei noch einmal betont, daß auch bei Erfüllung der genannten vier Validierungskriterien ein fehlerhaftes Modellergebnis nicht vollständig ausgeschlossen werden kann (Unmöglichkeit der Verifikation, vgl. Popper, 1982). Daher sollte als Teil des Validierungskonzeptes eine "Ergebniskontrolle" durchgeführt werden (Abschnitt 4.2.5). Dazu sollte für jedes Modellergebnis eine kontinuierliche Qualitätskontrolle durchgeführt werden und die Modellergebnisse sollten anhand von Messungen, Ergebnissen anderer Modelle oder von Plausibilitätsüberlegungen auf Richtigkeit geprüft werden. Sind die Modellergebnisse im Einzelfall falsch, so darf das Modell nicht mehr als validiert angesehen werden. Dann muß eine Korrektur des Modells vorgenommen und die Validierung sollte vollständig wiederholt werden. Würde nur eine Modellkorrektur vorgenommen und das Modell nicht erneut validiert, sondern nur bezüglich der vorgenommenen Änderung am Einzelfall verifiziert, so könnte eine nur für die spezielle Anwendung gültige "Verbesserung" des Modells nicht ausgeschlossen werden, die gleichzeitig mit schlechteren Ergebnissen bei anderen Modellanwendungen verbunden sein kann. Bei erneuter Anwendung des vollständigen Validierungskonzeptes auf das Modell ist die Möglichkeit, falsche Modellergebnisse zu erhalten, deutlich geringer. Ein danach geprüftes Modell kann, solange keine Falsifikation erfolgte, als validiert bezeichnet werden.

In Hinblick auf die Vielfalt der möglichen Modellanwendungen und die unterschiedlichen Zielvorstellungen bei der Modellentwicklung wird das oben skizzierte Validierungskonzept für sechs Bereiche abgeleitet, die jeweils typische Anwendungsbereiche eines Modells charakterisieren (vgl. Tabelle 4-1). Für alle Bereiche verbleibt es das übereinstimmende Ziel, das zu validierende Modell jeweils in Hinblick auf realitätsnahe Anwendungen zu prüfen.

		⇐ <i>Erweitere Validierung</i> ⇒	
		⇐ <i>Basisvalidierung</i> ⇒ (Grundversion des Modells)	(Erweitertes Modell)
	Dynamik	jeweils	fünf
	Thermodynamik	Validierungskriterien	sind für jeden Bereich
	Stoffdynamik	zu	prüfen

Tabelle 4-1 Bereiche, die im Validierungskonzept unterschieden werden. Die *Basisvalidierung* ist Teil der *erweiterten Validierung*, die Validierung der "Dynamik" Teil der "Thermodynamik" und diese Teil der "Stoffdynamik"

Grundsätzlich unterschieden wird im Validierungskonzept zwischen der sogenannten *Basisvalidierung* und der *erweiterten Validierung* eines Modells. Die *Basisvalidierung* bezieht sich auf eine Modellkonfiguration, die bestimmte Eigenschaften mindestens enthalten muß, um damit ausgewählte atmosphärische Phänomene simulieren zu können. Die *erweitere Validierung* erfolgt für eine Modellversion, die gegenüber der Grundversion zusätzliche Eigenschaften aufweist und geeignet sein sollte, sämtliche Phänomene der betrachteten Skala zu simulieren. Die *erweitere Validierung* umfaßt also die *Basisvalidierung*.

Neben der Einteilung in die beiden genannten Bereiche wird zusätzlich im Validierungskonzept zwischen den Bereichen "Dynamik", "Thermodynamik" und "Stoffdynamik" unterschieden. Dadurch wird eine grobe Klassierung nach typischen Modellanwendungsbereichen vorgenommen. Unter dem Begriff "Dynamik" werden atmosphärische Phänomene zusammengefaßt, die durch Rauigkeitsunterschiede und Orographieeinflüsse ausgelöst werden, bei denen horizontale Temperaturunterschiede aber von untergeordneter Bedeutung sind (z.B. Um- und Überströmung von Hügeln und Bergen, Kanalisierung von Strömungen in Tälern, orographisch bedingte Leewellen). Für sie ist das Verhältnis der Advektion zur horizontalen Druckgradientkraft viel größer als 1 (vgl. ANHANG E). Bei Phänomenen aus dem Bereich "Thermodynamik" sind auch horizontale Temperatur- oder Feuchteunterschiede bedeutsam, es können sich Wolken bilden und Niederschläge entstehen (z.B. Land-Seewind Zirkulation, Berg-Tal-Winde, urbane Wärmeinsel, katabatische Winde, konvektive Phänomene). Ein in diesem Bereich validiertes Modell muß auch die

Phänomene aus dem Bereich der "Dynamik" simulieren können. Sämtliche Phänomene der Skala und zusätzliche Prozesse, die mit dem Stofftransport verbunden sind (z.B. Deposition, Emissionseinflüsse) muß ein Modell simulieren können, das im Bereich "Stoffdynamik" vollständig validiert ist. Dabei werden chemische Umsetzungen in dieser Arbeit allerdings ausgeschlossen, sie sollten in ein speziell dafür zu entwickelndes Validierungskonzept einbezogen werden.

Der Anwendungsbereich eines Modells ist am geringsten, wenn für ein Modell nur im Bereich "Dynamik" eine *Basisvalidierung* bzw. eine *erweiterte Validierung* durchgeführt wurde (hellgrau unterlegte Fläche in Tabelle 4-1). Der Anwendungsbereich des Modells ist am größten, wenn eine *erweiterte Validierung* für den Bereich "Stoffdynamik" erfolgt ist (am dunkelsten unterlegte Fläche in Tabelle 4-1). Die Kriterien des Validierungskonzeptes sind so ausgelegt, daß ein Modell, das in diesem Bereich validiert ist, gleichzeitig in allen anderen Bereichen validiert ist. Es kann dann als vollständig validiert für die betrachtete Skala angesehen werden.

Wesentliche Voraussetzung des Validierungskonzeptes ist es, daß die fünf Kriterien, die in jedem Bereich erfüllt sein müssen, auf die gleiche Modellversion angewendet werden. Daher müssen auch alle Modellrechnungen mit der gleichen Modellversion durchgeführt werden. Diese Modellversion, nicht ein ganzes Modell mit seinen verschiedenen Konfigurationen, ist dann validiert. Anpassungen des Modells in Hinblick auf einzelne Validierungskriterien oder das zu simulierende Phänomen dürfen nicht erfolgen, da dadurch bei einzelnen Prüfpunkten unterschiedliche Modelle validiert würden und somit das Validierungskonzept nicht geschlossen angewendet würde. Aus diesem Grunde muß ein Modell auch nach jeder Modelländerung (z.B. neue Parametrisierung, geänderte Numerik, veränderte Initialisierung) und für jede Modellkonfiguration erneut geschlossen validiert werden.

Wird die Validierung anhand des hier vorgeschlagenen Konzeptes vorgenommen, so sollte der Aufwand dafür nach erstmaliger Installation des Konzeptes bei etwa einem Monat liegen. Für die erstmalige Anwendung liegt er um ein Vielfaches höher. Dieses mag viel erscheinen; da aber jedes Modellergebnis nur so glaubhaft ist, wie die Prüfung der genutzten Modellkonfiguration wissenschaftlich anerkannten Kriterien genügt, ist der Aufwand unumgänglich, wenn wissenschaftlich anerkannte Aussagen aus Modellergebnissen abgeleitet werden sollen.

Das vorgeschlagene Validierungskonzept beruht selbstverständlich auf den gegenwärtigen Kenntnissen bzgl. der Modellierung atmosphärischer Phänomene und der Berücksichtigung atmosphärischer Prozesse in Modellen. Vor allem die einzelnen Prüfpunkte, die im nächsten Abschnitt erläutert werden, sollten daher nicht als eine für immer gültige Wahrheit, sondern als Idee zur gegenwärtigen "Validierung hochauflösender Regionalmodelle" angesehen werden. In Hinblick auf

hier evtl. noch fehlende Teilaspekte ist das Validierungskonzept offen angelegt, so daß neue wissenschaftliche Erkenntnisse und zukünftige Erweiterungen der Modelle zu einem hinsichtlich der Prüfpunkte modifizierten oder erweiterten Validierungskonzept führen können. Das Validierungskonzept kann auch dann in seiner Struktur beibehalten werden.

4.2 Prüfpunkte des Validierungskonzeptes

In den folgenden Abschnitten werden die fünf Kriterien des Validierungskonzeptes für hochauflösende Regionalmodelle ausgeführt und die einzelnen Prüfpunkte vorgestellt.

4.2.1 Vollständigkeit

Entsprechend der Skala, für die ein Modell validiert werden soll, können unterschiedliche atmosphärische Phänomene entstehen (vgl. Abbildung 1-1). Sie können sowohl mehr dynamisch als auch mehr thermisch bedingt sein. Mit hochauflösenden Regionalmodellen, die u.a. zur kleinräumigen Wettervorhersage, der Regionalisierung von Klimamodellergebnissen und für Schadstofftransportrechnungen genutzt werden, sollten die in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ entstehenden Phänomene simuliert werden können. Dabei sind nicht für jedes zu simulierende Phänomen die gleichen Modelleigenschaften erforderlich. Mit einem validierten Modell sollten aber auch Phänomene realitätsnah modelliert werden können, die in die betrachtete Skala fallen und noch wenig erforscht oder unbekannt sind. Daher darf ein hochauflösendes Regionalmodell für realitätsnahe Anwendungen nur die in der Skala nach gegenwärtigem Kenntnisstand möglichen Näherungen enthalten.

Die "Vollständigkeit" der Modelleigenschaften wird für die Bereiche "Dynamik", "Thermodynamik" und "Stoffdynamik" für die *Basisvalidierung* und die *erweiterte Validierung* geprüft. Die Prüfpunkte sind so gewählt, daß die durch sie abgeforderten Modelleigenschaften für die Modellierung bestimmter Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ notwendig sind und durch sie Unterschiede im potentiellen Anwendungsbereich der Modelle verdeutlicht werden können. Die in jedem Bereich des Validierungskonzeptes erforderlichen Grundgleichungen, Approximationen, Parametrisierungen, Randbedingungen und sonstigen Eigenschaften sind in den Tabellen 4-2 und 4-3 zusammengestellt. Die Angaben basieren auf den Ausführungen des Kapitels 2. Wie dort erläutert, sollten in hochauflösenden Regionalmodellen nur bestimmte Approximationen gewählt werden

(Abschnitt 2.3), es können aber verschiedene Parametrisierungen subskaliger Prozesse mit gleicher Berechtigung genutzt werden. Mögliche Parametrisierungen werden in Abschnitt 2.4 ausführlich diskutiert, in Tabelle 4-3 werden einzelne Verfahren nicht empfohlen. Gleiches gilt für die Randbedingungen, die in Abschnitt 2.5 erläutert werden.

	Dynamik	Thermo- dynamik	Stoffdynamik
Wind prognostisch (Gl. 2-10)	ja	ja	ja
Temperatur prognostisch (Gl. 2-13)	ja	ja	ja
Feuchte prognostisch (Gl. 2-12)	evtl.	ja	ja
Flüssigwasser prognostisch (Gl. 2-12)	evtl.	falls nötig	falls nötig
Eis prognostisch (Gl. 2-12)	evtl.	falls nötig	falls nötig
Schadstoffkonzentration prognostisch (Gl. 2-12)	evtl.	evtl.	ja
Temperaturvariable konsistent formuliert (Abschnitt 2.1)	evtl.	ja	ja
Kontinuitätsgleichung - vollständig (Gl. 2-11) - anelastische Approximation (Gl. 2-24) - divergenzfreies Windfeld (Gl. 2-25)	} ja, alternativ	} ja, alternativ nein	} ja, alternativ nein
Boussinesq-Approximation - $\tilde{\rho}(\tilde{\theta}, \tilde{q}_1^1, \tilde{p})$ (Gl. 2-22) - $\tilde{\rho}(\tilde{\theta})$ (Gl. 2-23)	} ja, alternativ	ja nein	ja nein
Corioliskraft (Abschnitt 2.3.1, Punkt 8)	ja	ja	ja

Tabelle 4-2 Notwendige Gleichungen und mögliche Approximationen als Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Vollständigkeit".

	Dynamik	Thermo- dynamik	Stoffdynamik
stetiger Übergang der Flüsse zwischen Prandtl-schicht und Grenzschicht für alle Schichtungen (Abschnitt 2.4.1)	ja	ja	ja
Symmetrie des Schubspannungstensors (Abschnitt 2.4.1.1)	ja	ja	ja
Diffusionskoeffizienten skalarer Größen (Abschnitt 2.4.1.1; nach (Gl. 2-35) oder (Gl. 2-37))	ja	ja	ja
Turbulenzparametrisierung stabilitätsabhängig (Abschnitt 2.4.1.3)	ja	ja	ja
Konvektionsparametrisierung (Abschnitt 2.4.1.4)	evtl.	falls nötig	falls nötig
Wolkenmikrophysikparametrisierung (Abschnitt 2.4.2)	evtl.	falls nötig	falls nötig
Strahlungsflüsse in der Atmosphäre (Abschnitt 2.4.3)			
- kurzwellig	evtl.	falls nötig	falls nötig
- langwellig	evtl.	falls nötig	falls nötig
Hangneigung und Abschattung durch Berge (Abschnitt 2.4.3)	evtl.	falls nötig	falls nötig
Quellarten (Punkt, Linie, Fläche, Volumen, kalt, warm) (Abschnitt 2.4.4)	evtl.	evtl.	ja
Deposition (Gase, Partikel)			
- trocken (Abschnitt 2.4.5.1)	evtl.	evtl.	falls nötig
- naß (Abschnitt 2.4.5.2)	evtl.	evtl.	falls nötig
Bodenenergiebilanz (Abschnitt 2.5.4)	evtl.	ja	ja
Bodenfeuchtebilanz (Abschnitt 2.5.4)	evtl.	ja	ja
Bewuchs, Bebauung (Abschnitt 2.5.4)			
- eine Schicht bzw. z_0	ja	ja	ja
- mehrere Schichten	falls nötig	falls nötig	falls nötig
zeitabhängige großskalige Werte (Nesting) (Abschnitt 2.5.1)	nein	falls nötig	falls nötig
Grenzschicht vertikal aufgelöst gerechnet (mindestens 12 Schichten)	ja	ja	ja

Tabelle 4-3 Parametrisierungen, Randbedingungen und sonstige Anforderungen als Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Vollständigkeit".

Die mit "ja" gekennzeichneten Gleichungen (oberer Bereich, Tabelle 4-2), Approximationen (unterer Bereich, Tabelle 4-2) und Parametrisierungen (oberer Bereich, Tabelle 4-3), Randbedingungen (mittlerer Bereich, Tabelle 4-3) und sonstigen Eigenschaften (letzte Zeile, Tabelle 4-3) beschreiben die minimalen Anforderungen an ein hochauflösendes Regionalmodell. Diese sollten

in der Grundversion des Modells enthalten sein und beschreiben die Anforderungen der *Basisvalidierung*. Eigenschaften, die nur für bestimmte Modellanwendungen notwendig sind, sind mit "falls nötig" gekennzeichnet. Sie sollten für die *erweiterte Validierung* im Modell vorhanden sein. Ob z.B. die Flüssigphase und die Eisphase für die jeweilige Modellanwendung tatsächlich erforderlich sind oder eine Konvektionsparametrisierung nötig ist, wird mit Hilfe der "Ergebniskontrolle" für jeden Modellauf geprüft (vgl. Abschnitt 4.2.5). Die Notwendigkeit der Nutzung zeitabhängiger großskaliger Werte wird darüber nicht geprüft, sondern muß in Hinblick auf die beabsichtigten Modellsimulationen entschieden werden. Die Eigenschaften, bei denen in den Tabellen 4-2 und 4-3 ein "nein" vermerkt ist, sollte ein hochauflösendes Regionalmodell nicht aufweisen. Die mit "evtl." gekennzeichneten Eigenschaften können vorhanden sein, ohne die Modellphysik für den betrachteten Bereich zu verfälschen und zu Fehlern in den Modellergebnissen zu führen.

Ein hochauflösendes Regionalmodell erfüllt das Validierungskriterium "Vollständigkeit" für die *Basisvalidierung* des Modells, wenn es mindestens die in den Tabellen 4-2 und 4-3 mit "ja" gekennzeichneten Eigenschaften aufweist. Es ist von seinen Eigenschaften her auf beliebige Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ anwendbar, wenn es zusätzlich die in den Tabellen mit "falls nötig" gekennzeichneten Modelleigenschaften besitzt. Dann erfüllt es das Validierungskriterium "Vollständigkeit" auch bezüglich der *erweiterten Validierung*.

4.2.2 Nachvollziehbarkeit

Damit ein Modell als validiert gelten kann, müssen die Modellgrundlagen und die Modellergebnisse für Dritte verfügbar und nachvollziehbar dokumentiert sein. Auch der Modellcode selbst sollte als Quelltext Dritten zugänglich sein. Damit ist nicht gemeint, daß ein Modell allgemein zugänglich sein muß, ohne für dieses Modell z.B. Lizenzgebühren zu entrichten. Mit einer derartigen Forderung würden kommerziell genutzte Modelle das vorliegende Validierungskriterium nicht erfüllen können. Gemeint ist an dieser Stelle, daß ein Modell von mindestens einer anderen Gruppe als der Entwicklergruppe kompetent geprüft und betrieben wird, oder es einer unabhängigen Institution zur Prüfung vorgelegt wird.

Regionalmodelle sind äußerst komplex, so daß ihre Prüfung durch einzelne nahezu unmöglich ist. Daher sind neben ausführlichen Dokumentationen der Dynamik-, Thermodynamik- und Stoffdynamik-Teile des Modells Veröffentlichungen in Fachzeitschriften unbedingt erforderlich. Sie haben den Vorteil, durch externe Gutachter/innen weitgehend auf Richtigkeit geprüft und in der

wissenschaftlichen Fachwelt diskutiert worden zu sein. Ein validiertes Modell muß damit folgende Bedingungen erfüllen:

Dynamik	Thermodynamik	Stoffdynamik
Dokumentation muß allgemein zugänglich sein		
Programmcode muß Dritten zugänglich sein		
mehr als eine Veröffentlichung in begutachteten Fachzeitschriften pro Bereich, wobei mit einer Veröffentlichung mehrere Bereiche abgedeckt sein können		
Veröffentlichung der Modellvalidierung, die z.B. nach dem in dieser Arbeit vorgestellten Validierungskonzept erfolgen kann		

Tabelle 4-4 Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Nachvollziehbarkeit".

Erfüllt ein Modell die in Tabelle 4-4 zusammengestellten Prüfpunkte, so erfüllt es damit das zweite Validierungskriterium. Das Kriterium muß sowohl bei der *Basisvalidierung* als auch bei der *erweiterten Validierung* erfüllt sein.

4.2.3 Realisierungsgüte

Die Realisierung eines hochauflösenden Regionalmodells erfolgt üblicherweise auf Großrechnern oder Workstations, gelegentlich auch auf PCs. Da verschiedene Rechner eine unterschiedliche Genauigkeit besitzen können, ist es erforderlich, die Sensitivität der Modellergebnisse auf die Rechnergenauigkeit zu prüfen und, falls nötig, mit doppelter Genauigkeit zu rechnen. Zur Realisierung zählt auch die Programmierung des Modells, die beispielsweise in unterschiedlichen Sprachen, in Subroutine-Struktur oder objektorientiert erfolgen kann. Auf diese informationstechnischen Details soll hier nicht eingegangen werden. Auch die allgemeinen Anforderungen an Softwareentwurf und -design sollen in dieser Arbeit nicht erläutert werden (siehe z.B. VDI-GIS, 1993). Hier werden nur einige wesentliche Aspekte der Modellrealisierung aufgeführt, die für die Validierung eines Modells bedeutsam sind (Tabelle 4-5).

Die Realisierung eines Modells kann nur beurteilt werden, wenn dazu auch der Modellcode als Quelltext verfügbar ist. Dann lassen sich die Grundlagen und ihre Realisierung auf Übereinstimmung prüfen. Wie in Abschnitt 4.2.2 bereits erwähnt, kann die Überprüfung durch eine andere kompetente Nutzergruppe oder unabhängige Institution erfolgen.

Das Überprüfen fremder, aber auch komplexer eigener Programme ist außerordentlich schwierig. Um dieses zu erleichtern, sollte ein Programm zumindest folgende Anforderungen erfüllen: es sollte klar strukturiert sein, ausreichende Kommentare im Quelltext enthalten und ein Verzeichnis aufweisen, in dem alle Konstanten und Variablen mit ihrer Bedeutung beschrieben sind. Zusätzlich sollte ein Datenfluß- und ein Funktionsablaufdiagramm vorhanden sein. Folgt ein Programm vollständig vorgegebenen Programmierkonventionen, so erleichtert dies die Lesbarkeit. Zudem sollte der Standard einer weit verbreiteten Programmiersprache eingehalten werden, um eine leichte Nachvollziehbarkeit des Programmes und seine Nutzung auf verschiedensten Computern zu ermöglichen.

Die Fehleranfälligkeit eines Modells ist geringer, wenn einzelne Parametrisierungen von außen gesteuert werden können, ohne den Programmcode dafür ändern zu müssen. Dieses kann z.B. über wählbare Parameter geschehen. Dabei muß für die Benutzerin / den Benutzer klar bleiben, welchen Einfluß die Parameter auf die Modellphysik besitzen. Die gewählten Parameter müssen vom Modell auf ihre Gültigkeitsbereiche und Konsistenz geprüft werden und für jede Simulation mit dem Modell protokolliert werden, um die Nachvollziehbarkeit der Modellrechnungen zu gewährleisten.

Dynamik	Thermodynamik	Stoffdynamik
Standard einer Programmiersprache eingehalten		
Programmierkonventionen eingehalten		
Variablenverzeichnis vorhanden		
Datenflußdiagramm vorhanden		
Funktionsablaufdiagramm vorhanden		
Automatische Konsistenzprüfung im Modell (Parametrisierungen, Felddimensionen)		

Tabelle 4-5 Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Realisierungsgüte".

In Tabelle 4-5 sind die einzelnen Prüfpunkte den Bereichen "Dynamik", "Thermodynamik" und "Stoffdynamik" gemeinsam zugeordnet worden, da in allen Bereichen gleiche Anforderungen gestellt werden. Damit eine Modellrealisierung für gut befunden werden kann und das Validierungskriterium "Realisierungsgüte" erfüllt ist, müssen die Prüfpunkte für alle Bereiche sowohl bei der *Basisvalidierung* als auch bei der *erweiterten Validierung* erfüllt sein.

4.2.4 Ergebnisgüte

Die Güte der Modellergebnisse wird anhand verschiedener Anwendungstests geprüft. Zur Überprüfung eines hochauflösenden Regionalmodells geeignete Modellanwendungen sind in Kapitel 3 bereits vorgestellt worden. Sie sind dort so ausgewählt worden, daß mit ihnen jeweils bestimmte Modelleigenschaften geprüft werden können. Wird das Modell in Hinblick auf die realitätsnahe Simulation aller in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ entstehenden Phänomene geprüft (*erweiterte Validierung*), so ist die erfolgreiche Durchführung aller in Kapitel 3 aufgeführten Anwendungstests erforderlich. Für die *Basisvalidierung* müssen nur ausgewählte Modellanwendungen erfolgreich durchgeführt werden.

Die Zuordnung der Modellanwendungen zu den Bereichen "Dynamik", "Thermodynamik", "Stoffdynamik" des Validierungskonzeptes fällt zunächst schwer, da in den meisten Anwendungstests sowohl dynamische als auch thermodynamische Einflüsse vorhanden sind. In einigen Modellanwendungen ist aber der Einfluß thermodynamischer Prozesse von geringer Bedeutung, so daß diese Anwendungstests entsprechend ANHANG E dem Bereich "Dynamik" zugeordnet werden können (vgl. Tabelle 4-6). Die übrigen Modellanwendungen sind zur Prüfung der "Thermodynamik" bzw. "Stoffdynamik" des Modells geeignet. Dabei werden die Ergebnisse aus dem Bereich "Dynamik" zur Validierung der "Thermodynamik" vorausgesetzt, für eine Validierung der "Stoffdynamik" müssen zusätzlich die Anwendungstests beider Bereiche durchgeführt werden.

⇐ Stoffdynamik ⇒		
⇐ Thermodynamik ⇒		
⇐ Dynamik ⇒		
Winddrehung in der Grenzschicht (Abschnitt 3.2.1)	Inlandverlagerung einer Seewindfront (Abschnitt 3.4.1)	Unterschiedliche Quellstärken (Abschnitt 3.2.2)
	Grenzschicht-Datensatz (Abschnitt 3.5.1)	Stofftransport bei verschiedenen atmosphärischen Schichtungen (Abschnitt 3.3.2)
Bergüberströmungen (Abschnitt 3.3.1)	Seewindzirkulation mit Wolken- einfluß (Abschnitt 3.4.2)	Konzentration und Deposition (Abschnitt 3.4.3)
	Dreidimensionaler meteorologischer Mesoskala- β - / Mesoskala- γ -Datensatz (Abschnitt 3.5.2)	Datensatz von Ausbreitungs- experimenten (Abschnitt 3.5.3)

Tabelle 4-6 Anwendungstests als Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Ergebnisgüte". Dunkel unterlegt sind die Anwendungstests, die nur bei einer *erweiterten Validierung* durchzuführen sind. In den angegebenen Abschnitten sind die Eingangswerte und die zulässigen Fehlerbereiche beschrieben

Alle Modellrechnungen müssen, wie bereits in Abschnitt 4.1 erwähnt, mit dem dreidimensionalen Modell in der auch anhand der anderen Kriterien geprüften Konfiguration durchgeführt werden. Die Eingangswerte der Modellrechnungen und die Fehlerbereiche, die zur Beurteilung der Modellergebnisse herangezogen werden sollten, lassen sich den in Tabelle 4-6 aufgeführten Abschnitten entnehmen. Über flachem Gelände bei homogener Bodennutzung erfolgen die Modellanwendungen der Abschnitte 3.2.1, 3.2.2, 3.3.2 und 3.5.1. Eine homogene Verteilung der Bodennutzungseigenschaften wird auch in den Modellanwendungen des Abschnittes 3.3.1 vorausgesetzt, wobei aber Topographieeinflüsse enthalten sind. Die aufgeführten Modellanwendungen sowie Anwendungstest 3.4.1 müssen durchgeführt werden, wenn eine *Basisvalidierung* des Modells in den drei Bereichen erfolgen soll. Zusätzliche Modellanwendungen über realistischen Bodennutzungen und gegebenenfalls mit topographischen Einflüssen müssen erfolgen, wenn das Modell entsprechend der *erweiterten Validierung* geprüft werden soll (Abschnitte 3.4.2, 3.4.3 und 3.5.2, 3.5.3). Diese, optionale Modelleigenschaften voraussetzenden Anwendungstests, sind in Tabelle 4-6 dunkel unterlegt.

Ein hochauflösendes Regionalmodell erfüllt das Validierungskriterium "Ergebnisgüte", wenn die Ergebnisse der für den Bereich erforderlichen Modellsimulationen nur im Rahmen der in Kapitel 3 bei den jeweiligen Anwendungstests aufgeführten Fehlerbereiche von den Vergleichslösungen abweichen.

4.2.5 Ergebniskontrolle

Die aufgeführten Validierungskriterien prüfen das Potential des Modells (4.2.1, 4.2.2, 4.2.3) und anhand beispielhafter Modellanwendungen die grundsätzliche Qualität der Modellergebnisse (Abschnitt 4.2.4). Die Modellanwendungen sind so ausgewählt, daß durch die stichprobenartige Simulation ausgewählter atmosphärischer Phänomene möglichst viele Prozesse modelliert werden, die für Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ bedeutsam sind. Allerdings kann trotzdem nicht ausgeschlossen werden, daß die Ergebnisse einer neuen Modellanwendung realitätsfern sind. Die Realitätsnähe der simulierten Phänomene muß jeweils geprüft werden, damit ein Modell als validiert gelten kann. Läßt sich ein bestimmtes Phänomen nicht realitätsnah simulieren, so ist das Modell falsifiziert (vgl. Definitionen in Kapitel 1).

Damit die Kontrolle der Modellergebnisse möglichst allgemein und automatisiert möglich ist, müssen Prüfungen durchgeführt werden, die unabhängig vom simulierten Phänomen sind. Entsprechende Prüfpunkte sind in Tabelle 4-7 zusammengefaßt.

	⇐ Stoffdynamik ⇒		
	⇐ Thermodynamik ⇒		
	⇐ Dynamik ⇒		
Zeitreihen am Kontrollgitterpunkt	$\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \bar{\theta}$	$\bar{q}_1^1, \bar{q}_1^{2C}, \bar{q}_1^{2R}, \bar{q}_1^3$	\bar{C}
	⇐ keine 2 Δt - Wellen ⇒		
Zeitreihen der Position der Maxima der schichtweise berechneten Standardabweichungen	$x, y, z \begin{pmatrix} S_{\bar{u}}, S_{\bar{v}}, S_{\bar{w}}, \\ S_{\bar{\theta}} \end{pmatrix}$	$x, y, z \begin{pmatrix} S_{\bar{q}_1^1}, S_{\bar{q}_1^{2C}}, \\ S_{\bar{q}_1^{2R}}, S_{\bar{q}_1^3} \end{pmatrix}$	$x, y, z (S_{\bar{C}})$
	maximale Standardabweichungen dürfen nicht an den offenen Rändern verbleiben oder von dort in das Gebietsinnere wandern		
Zeitreihen der Gebietsmittelwerte	$\nabla \rho_0 \bar{v}, \bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \bar{\theta}$	$\bar{q}_1^1, \bar{q}_1^{2C}, \bar{q}_1^{2R}, \bar{q}_1^3$	\bar{C}
	⇐ keine 2 Δt - Wellen; keine monotone Zu- oder Abnahme* ⇒		
Prüfung der Einzelwerte pro Gitterpunkt und pro Zeitschritt†	$-60 \leq \bar{u}, \bar{v} \leq 60$ [m/s] $-6 \leq \bar{w} \leq 6$ [m/s] $200 \leq \bar{\theta} \leq 400$ [K]	$0 \leq \bar{q}_1^1 \leq 11 \cdot q_{1\text{sat}}^{\text{Wasser}}$ $0 \leq \bar{q}_1^1 \leq 11 \cdot q_{1\text{sat}}^{\text{Eis}}$ $0 \leq \bar{q}_1^{2C}, \bar{q}_1^{2R}, \bar{q}_1^3 \leq 4$ [g/kg]	$0 \leq \bar{C} \leq Q_{\text{SC}} \cdot t \cdot V_Q / \rho_Q$ [kg/kg] $0 \leq v_{D\chi} \leq 0.1$ [m/s]
Horizontal- und Vertikal-schnitte zu den Kontrollzeitpunkten in der häufigsten Schicht maximaler Standardabweichungen	$\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \bar{\theta}$	$\bar{q}_1^1, \bar{q}_1^{2C}, \bar{q}_1^{2R}, \bar{q}_1^3$	\bar{C}
	⇐ keine 2 Δt - Wellen ⇒		
Testlauf doppelte Horizontalauflösung bei reduzierter Integrationszeit‡	$D_{\text{max}}(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \leq \max \begin{cases} 0.5 [\text{m/s}] \\ 0.1 \cdot (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \end{cases}$ $D_{\text{max}}(\bar{\theta}) \leq 0.5 \text{K}$ $R_{\text{OP}}(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \bar{\theta}) > 0.9$	$D_{\text{max}}(\bar{q}_1^1) \leq 1$ [g/kg] $D_{\text{max}}(\bar{q}_1^{2C}, \bar{q}_1^{2R}, \bar{q}_1^3) \leq 0.4$ [g/kg] $R_{\text{OP}}(\bar{q}_1^1, \bar{q}_1^{2C}, \bar{q}_1^{2R}, \bar{q}_1^3) > 0.9$	$R_{\text{OP}}(\bar{C}) > 0.9$
Ergebnisprüfung	Qualitative und (möglichst) quantitative Vergleiche der Modellergebnisse mit Messungen und Ergebnissen anderer Modelle und Plausibilitätsprüfung		

Tabelle 4-7 Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Ergebniskontrolle".

Die Prüfung der Stabilität der numerischen Verfahren kann durch die Ausgabe von Zeitreihen ausgewählter Größen an einem Kontrollgitterpunkt in etwa 600 m Höhe und horizontal in der Mitte des

* Ausnahme: die Zu- oder Abnahme ist physikalisch oder durch externes Forcing bedingt.

† Begrenzung des Wolkenwassergehaltes nach typischen Maximalwerten (J. Jensen, 1994, persönliche Mitteilung); Begrenzung spezifische Feuchte nach Plausibilitätsüberlegungen (Erfordernis Wolkenparametrisierung, Erfordernis Eisphase. Die Eisphase wird erst ab Temperaturen unterhalb von -20°C bei entsprechender Übersättigung erforderlich); Begrenzung Konzentrationen und Flüsse nach Plausibilitätsüberlegungen; Begrenzung Depositionsgeschwindigkeiten nach Messungen; alle anderen Werte entsprechend US-Standardatmosphäre begrenzt (vgl. Dutton, 1976). Ausnahmen bei der Windgeschwindigkeit: Simulation von z.B. Tornados oder des Strahlstroms im Tropopausenniveau. Dann sind Extrema von 100 m/s möglich (Dutton, 1976).

‡ Erforderlich bei allen grundlegenden Modellanwendungen sowie Anwendungen des Modells auf ein neues Gebiet oder andere meteorologische Situationen (z.B. Tief- statt Hochdruckgebiet).

Modellgebietes erfolgen. An diesem Gitterpunkt sollten zur Prüfung der "Dynamik" die Komponenten des Windvektors und die Temperatur, zur Prüfung der "Thermodynamik" zusätzlich Feuchte, Wolken- und Regenwasser und zur Prüfung der "Stoffdynamik" außerdem die Konzentrationen ausgegeben werden. Zur weiteren Kontrolle sollte zu jedem Zeitpunkt die Gesamtdivergenz, sowie die über das Modellgebiet gemittelten Werte der oben genannten Größen protokolliert werden. Zusätzlich sollten schichtweise (in x-, y- und z-Richtung) die Standardabweichungen, bezogen auf ein mittleres Vertikalprofil, berechnet und die Positionen ausgegeben werden, an denen die maximalen Standardabweichungen entstehen.

Mit Hilfe der Zeitserien lassen sich verschiedene typische Modellfehler leicht aufdecken und somit die Vertrauenswürdigkeit neuer Modellergebnisse leichter beurteilen. Wenn die Maximalwerte der Standardabweichungen am Rand des Modellgebietes liegen oder mit zunehmender Vorhersagezeit vom Rand nach innen wandern, ist das Modellgebiet zu klein oder es treten Reflexionen an den Rändern auf. Eine Ausnahme bilden Maximalwerte am unteren Rand, der eine physikalische Berandung bildet und physikalisch begründete Störungen auslösen kann. Durchwandernde Fronten (Nesting des Regionalmodells) können ebenfalls kurzzeitig zu erhöhten Standardabweichungen an den seitlichen Rändern führen. Diese Störungen dürfen aber nicht längerfristig dort bleiben.

Zeigen die Zeitserien der mittleren Größen während der gesamten Vorhersage ein monotones Wachsen oder Fallen der Größen, dem eine physikalische Ursache nicht zugeordnet werden kann, so ist die Lösung wahrscheinlich numerisch instabil und die Simulationsergebnisse sind höchstwahrscheinlich falsch. Ursache für ein derartiges Zeitverhalten des Modells ist häufig ein zu großer Zeitschritt des Modells. Numerisch instabil ist die Modellrechnung auch, wenn die Zeitserien der Gebietsmittelwerte oder der Einzelwerte am Kontrollgitterpunkt hochfrequente Fluktuationen zeigen, insbesondere wenn deren Periode $2\Delta t$ beträgt. Fehlerbehaftet sind die Modellergebnisse meist auch, wenn die Standardabweichung, die auf Basis der Zeitserie der Mittelwerte berechnet wird, über der liegt, die sich aus den Einzelwerten am Kontrollgitterpunkt ergibt. In diesem Fall kann es sich aber auch um ein vom Boden abgehobenes Phänomen handeln (z.B. hochreichende Wolken). Dafür können die beiden Standardabweichungen einen Hinweis liefern, sie sind aber kein Kriterium für fehlerbehaftete Modellergebnisse.

Die Zeitserien am Kontrollgitterpunkt sind auch geeignet, das Zeitverhalten des Modells aufgrund nicht an die Modellphysik angepaßter Anfangswerte zu kontrollieren. Während der Anpassungsphase entstehen im Vergleich zu späteren Änderungen große zeitliche Änderungen in den Modellergebnissen. Diese sind besonders deutlich in den Zeitserien zu erkennen, wenn die physikalisch bedingten Änderungen gering sind. In diesem Fall läßt sich aufgrund sich vermindernder zeitlicher Änderungen anhand der Zeitserie die Initialisierungsphase des Modells abschätzen.

Auch die Einzelwerte des Modells sollten auf Plausibilität geprüft werden. Dieses kann automatisiert während der Modellrechnung erfolgen. Die Modellergebnisse sind falsch, wenn Temperatur, Feuchte, Flüssigwasser- oder Eisgehalt oder die Konzentrationen negative Werte annehmen bzw. außerhalb physikalisch plausibler Grenzen liegen. Dieser Fehler hat meist numerische Ursachen, kann aber auch durch fehlende Modellphysik oder falsch implementierte Parametrisierungen hervorgerufen werden. Die Grenzen, die hier gewählt werden, sind dabei so festgelegt, daß darüber auch die Notwendigkeit anderer Parametrisierungen abgeleitet werden kann (Tabelle 4-7). Liegt beispielsweise die relative Feuchte über 110%, so müssen wolkenphysikalische Prozesse in den Modellsimulationen berücksichtigt werden, wenn das Modellergebnis realitätsnah sein soll. Analoges läßt sich für die Notwendigkeit der Eisphase ableiten.

Zusätzlich zur Kontrolle des Zeitverhaltens der Vorhersage muß auch die räumliche Struktur der Modellergebnisse auf Plausibilität geprüft werden. Dazu sollten für alle modellierten Größen zu bestimmten Kontrollzeitpunkten (z.B. alle 3 Stunden) horizontale und vertikale Schnitte in den Schichten maximaler Standardabweichung angefertigt werden. Alternativ dazu könnten auch Spektren gerechnet werden. Weisen die räumlichen Strukturen Fluktationen großer Amplitude auf, deren horizontale Ausdehnungen weniger als vier Gitterweiten entsprechen, so sind die Modellergebnisse als nicht realitätsnah anzusehen.

Die Ergebnisse sind auch dann nicht realitätsnah, wenn ein Testlauf mit doppelter Auflösung qualitativ andere Modellergebnisse liefert. Für die Testrechnung reicht eine verkürzte Integrationszeit, z.B. für die Simulation einer Bergüberströmung bei stabiler Schichtung (Abschnitt 3.3.1) sechs Stunden. Für Anwendungsfälle, bei denen sich die Schichtung zeitlich ändert (z.B. Land-Seewind Zirkulation, Abschnitte 3.4.1, 3.4.2) wird eine längere Integrationszeit benötigt, da erst die tagsüber entstehenden Temperaturgradienten zu den Druckgradienten führen, die das mesoskalige System antreiben. Daher muß z.B. für simulierte Tagesgänge die Integrationszeit bis etwa 18 Uhr ausgedehnt werden, um den Einfluß der instabilen Schichtung auf die Modellergebnisse abschätzen zu können.

Trotz der verkürzten Integrationszeit verursacht die Modellrechnung mit doppelter Horizontalauflösung den höchsten zusätzlichen Rechenaufwand. Daher kann sie routinemäßig nicht durchgeführt werden. Sie sollte aber zur Aufdeckung von Modellunzulänglichkeiten für alle grundlegenden Modellanwendungen (Kriterium "Ergebnisgüte", Abschnitt 4.2.4), bei Modellrechnungen für neue Modellgebiete, bei veränderten meteorologischen Bedingungen oder bei Unsicherheiten der Modellnutzer/innen hinsichtlich der Glaubwürdigkeit der Modellergebnisse durchgeführt werden. Mit Hilfe eines zusätzlichen Auswerteprogramms läßt sich dann überprüfen, ob die Abweichungen

zwischen den Modellergebnissen unterschiedlicher Auflösung bezogen auf das gröbere Gitter die in Tabelle 4-7 angegebenen Werte überschreiten. Dieses ist ein Hinweis darauf, daß die genutzten Parametrisierungen nicht ausreichen, um das zu simulierende Phänomen und die entstehenden subskaligen Prozesse zu beschreiben. Die Fehlerangaben in Tabelle 4-7 basieren auf typischen Meßgenauigkeiten (vgl. Kapitel 3). Hier werden diese und keine geringeren Abweichungen als Fehlermaß herangezogen, da sich allein aufgrund der Diskretisierung Modellergebnisse verschiedener Auflösung unterscheiden können. Bei halbiertes Gitter können sich z.B. die horizontalen Temperaturgradienten verdoppeln, damit wachsen auch die Druckgradienten, und es können z.B. höhere Vertikalwinde entstehen. Bei Interpolation auf das gröbere Gitter sollten die Unterschiede aber gering sein und die verbleibenden Abweichungen unterhalb der typischen Meßgenauigkeit liegen.

Alle Ergebnisse eines Modells sollten anhand von Messungen, anderen Modellergebnissen und über Plausibilitätsüberlegungen soweit wie möglich auf Richtigkeit geprüft werden. Dieser Prüfpunkt verbleibt subjektiv, auch wenn er sich in Hinblick auf die erlaubten Abweichungen teilweise objektivieren läßt (vgl. Abschnitt 3.5). Ihm kommt trotzdem im Rahmen des Validierungskonzeptes eine große Bedeutung zu, da er, neben den anderen Prüfpunkten des Kriteriums "Ergebniskontrolle", für die potentielle Falsifikation eines Modells entscheidend ist. Werden die Prüfpunkte des Validierungskriteriums "Ergebniskontrolle" bei allen Modellrechnungen erfüllt, so erfüllt ein hochauflösendes Regionalmodell auch insgesamt das Validierungskriterium.

Mit Hilfe der "Ergebniskontrolle" können das numerische Verhalten des Modells, die Eignung der genutzten Parametrisierungen (Wolkenmikrophysikparametrisierung; Eisphase) und die Plausibilität der Ergebnisse geprüft werden. Hinweise auf Fehler in anderen Parametrisierungen oder auf falsch genutzte Approximationen (z.B. hydrostatische Approximation bei Konvektion) sind von diesen Prüfpunkten nicht zu erhalten. Entsprechende Prüfungen sind aber bereits in den Tabellen 4-2 und 4-3 beim Kriterium "Vollständigkeit" durchgeführt worden. Insgesamt erlaubt das vorgeschlagene Validierungskonzept eine weitgehende Reduktion von Fehlermöglichkeiten in hochauflösenden Regionalmodellen und, bei sorgfältiger Durchführung der "Ergebniskontrolle", eine kontinuierliche Prüfung der Ergebnisse.

5 Anwendung des Validierungskonzeptes

Das in Kapitel 4 vorgestellte Validierungskonzept wird in diesem Kapitel beispielhaft angewandt. In Abschnitt 5.1 wird das Validierungskriterium "Vollständigkeit" verwendet, um verschiedene hochauflösende Regionalmodelle hinsichtlich ihrer Modelleigenschaften vergleichend gegenüberzustellen. Vollständig wird das Validierungskonzept für eine *Basisvalidierung* des mesoskaligen Transport- und Strömungsmodells METRAS genutzt (Abschnitt 5.2).

5.1 Gegenüberstellung einiger nichthydrostatischer mesoskaliger Modelle in Hinblick auf ihre Modelleigenschaften

In Abschnitt 4.2.1 sind für das Validierungskriterium "Vollständigkeit" Eigenschaften zusammengestellt worden, die ein hochauflösendes Regionalmodell nach dem vorgeschlagenen Validierungskonzept aufweisen sollte, um auf beliebige Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ anwendbar zu sein. Nach dem Konzept sollte ein hochauflösendes Regionalmodell die in den Tabellen 4-2, 4-3 mit "ja" gekennzeichneten für eine *Basisvalidierung* enthalten und zusätzlich für eine *erweiterte Validierung* die mit "falls nötig" bezeichneten Eigenschaften aufweisen. Letztere sind nur für die Simulation bestimmter atmosphärischer Phänomene erforderlich.

Beispielhaft werden für die Gegenüberstellung der Modelleigenschaften die Modelle EURAD-MM5 (Inst. f. Geophysik u. Meteorologie der Universität zu Köln), EZM (Institut für Technische Thermodynamik, Universität Karlsruhe), FITNAH (Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover), GESIMA (Institut für Gewässerphysik, GKSS Geesthacht), KAMM (Institut für Meteorologie und Klimaforschung, KfK Karlsruhe und Universität Karlsruhe), MESOSCOP (Institut für Physik der Atmosphäre, DLR Oberpfaffenhofen) und METRAS (Meteorologisches Institut, Universität Hamburg) betrachtet, die alle auch zur Simulation von Phänomenen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ genutzt werden. Zusätzlich wird die analytische Lösung in Abschnitt 3.3.1 herangezogen, die, wie bereits in Abschnitt 2.8 erwähnt, als hochauflösendes Regionalmodell nicht geeignet ist. Dieses wird auch ein Ergebnis der nachfolgenden Gegenüberstellung sein.

Die Basisinformationen für die Zusammenstellung der Modelleigenschaften wurden einer Arbeit von Schlünzen (1994a) und der in Tabelle H-1 angegebenen Literatur entnommen, ergänzt durch

Informationen zum Modell EURAD-MM5 (Memmesheimer, 1994, persönliche Mitteilung). Die Gegenüberstellung spiegelt dabei den Stand der Modellentwicklung im April 1994 wider. Inzwischen erfolgte Weiterentwicklungen der Modelle wurden mit Ausnahme der Arbeiten von Eppel et al. (1995) und Lüpkes und Schlünzen (1995) nicht berücksichtigt. Die aktuellen Eigenschaften der Modelle können daher andere sein, als sie in dieser Zusammenstellung erscheinen.

In ANHANG H sind die Eigenschaften der betrachteten Modelle und der analytischen Lösung in Tabellenform dargestellt. Dabei wurden nur die Eigenschaften berücksichtigt, die ein hochauflösendes Regionalmodell nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" aufweisen sollte. Auf Basis der Tabellen in ANHANG H lassen sich die Eigenschaften der Modelle summarisch darstellen. Dabei werden die Modelleigenschaften, die für eine *Basisvalidierung* der Modelle erforderlich sind, und diejenigen, die für die *erweiterte Validierung* zusätzlich benötigt werden, getrennt betrachtet. Eigenschaften eines Modells, die in den Tabellen H-2 bis H-4 -it "ja/nein" gekennzeichnet sind, werden bei der Gesamtbewertung so berücksichtigt, als wären sie in 50 % der Modellanwendungen erfüllt. Den Modellen wird die entsprechende Modelleigenschaft als zur Hälfte vorhanden zugeordnet.

Eine Zusammenstellung der Modelleigenschaften auf die hier erfolgte summarische Weise erlaubt es, einen Überblick über die Zahl der Modelleigenschaften zu erhalten und Modelle zu erkennen, die nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" für realitätsnahe Anwendungen in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ von der Zahl ihrer Eigenschaften her ungeeignet sind. Die Gegenüberstellung erlaubt es aber nicht, zwischen etwa gleichwertigen Modellen, die etwa gleich viele Eigenschaften aufweisen, eine Entscheidung hinsichtlich ihrer Güte zu treffen. Dazu müssen die einzelnen Modelleigenschaften genau betrachtet werden. Zudem kann aus der Anzahl der Modelleigenschaften nicht geschlossen werden, daß ein Modell auch für alle diese Eigenschaften gute Ergebnisse liefert. Dazu darf nicht nur das Validierungskriterium "Vollständigkeit" betrachtet werden. Hierfür müssen auch die Kriterien "Nachvollziehbarkeit", "Realisierungsgüte" und "Ergebniskontrolle" herangezogen werden, und es muß vor allem die Güte der Modellergebnisse anhand ausgewählter Anwendungstests geprüft werden ("Ergebnisgüte").

In den folgenden drei Abschnitten werden die Eigenschaften der betrachteten Modelle summarisch für die Bereiche "Dynamik", "Thermodynamik" und "Stoffdynamik" zusammengestellt.

5.1.1 Bereich "Dynamik"

Im Bereich "Dynamik" sind nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" insgesamt 11 Modelleigenschaften erforderlich. Dabei unterscheiden sich die Anforderungen der *Basisvalidierung* und der *erweiterten Validierung* nur hinsichtlich der Parametrisierung von Bewuchsschichten.

In den numerischen Modellen sind die erforderlichen Eigenschaften weitgehend enthalten, nur die analytische Lösung fällt deutlich ab (Abbildung 5-1). Sie weist nur 3 der 11 Eigenschaften auf, die nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" für die *Basisvalidierung* der "Dynamik" erforderlich sind, und ist danach für realitätsnahe Modellanwendungen nicht geeignet.

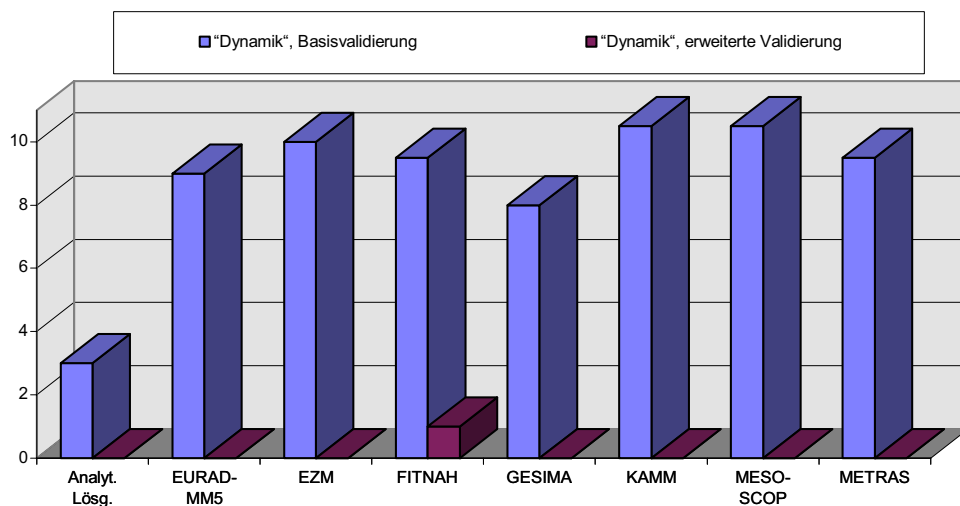


Abbildung 5-1 Gegenüberstellung von analytischer Lösung und verschiedenen hochauflösenden Regionalmodellen auf Basis des Validierungskriteriums "Vollständigkeit", Bereich "Dynamik" (11 Modelleigenschaften für die *Basisvalidierung* erforderlich, für die *erweiterte Validierung* bis zu einer zusätzlichen Eigenschaft notwendig (insgesamt 12)).

Die numerischen Modelle sind weitgehend gleichwertig. Dabei sind in allen Modellen die Flüsse im Übergangsbereich zwischen Prandtlschicht und übriger Grenzschicht grundsätzlich, bei bestimmten Turbulenzparametrisierungen oder bei bestimmten atmosphärischen Schichtungen unstetig. In einigen Modellen ist der Schubspannungstensor nicht immer symmetrisch (EURAD-MM5, FITNAH, GESIMA), oder die Vertikalauflösung ist in der Grenzschicht zu gering (EURAD-MM5). Die Diffusionskoeffizienten für skalare Größen werden in manchen Modellen als Vektor (FITNAH, GESIMA, METRAS) und nicht, wie theoretisch richtiger, als Tensor zweiter Stufe oder als Skalar berücksichtigt. Bis auf FITNAH verwenden alle Modelle maximal eine Bewuchsschicht.

Die fehlende Symmetrie des Schubspannungstensors ist bei großen horizontalen Gitterweiten und geringen Vertikalwinden von untergeordneter Bedeutung, für die Simulation von Phänomenen der Mesoskala- γ sollte er aber symmetrisch sein (vgl. Abschnitt 2.4.1). Unstetige Übergänge der turbulenten Flüsse können zu Fehlern in den Modellergebnissen insbesondere im bodennahen Bereich führen; daher sind stetige Formulierungen vorzuziehen. Hinsichtlich der Diffusionskoeffizienten für skalare Größen ist eine Berechnung als Tensor zweiter Stufe allen anderen Formulierungen vorzuziehen, wenn horizontal inhomogene Verhältnisse vorliegen. Sonst kann er auch als Skalar berechnet werden, wodurch sich die in den Modellen FITNAH, GESIMA und METRAS verwendete und auch sonst übliche Vektorformulierung vereinfachen würde.

Die genannten Einschränkungen hinsichtlich der für eine *Basisvalidierung* des Modells erforderlichen Modelleigenschaften sind meist nur mit relativ großem Aufwand zu beheben. In Hinblick auf die Simulation horizontal inhomogener Strukturen und die Berechnung bodennaher Werte sollten die Eigenschaften in den Modellen ergänzt werden. Mehrere Bewuchsschichten sind erforderlich, wenn auch Berechnungen innerhalb des Bewuchses erfolgen sollen, oder dieser der wesentliche Einflußparameter für das Strömungsfeld ist.

5.1.2 Bereich "Thermodynamik"

Die 15 notwendigen Eigenschaften zur *Basisvalidierung* der "Thermodynamik" weisen die numerischen Modelle ebenfalls zu einem wesentlichen Teil auf, die analytische Lösung fällt wieder deutlich ab (Abbildung 5-2).

In den meisten numerischen Modellen wird die Kontinuitätsgleichung oder die Boussinesq-Approximation nicht für hochreichende, konvektive Prozesse formuliert worden, so daß bei hochreichender Konvektion Fehler in den Modellergebnissen entstehen können (EZM, FITNAH, GESIMA, KAMM). Im Modell MESOSCOP werden die Bodenenergie- und -feuchtebilanz nicht gelöst, hier müssen die Oberflächentemperaturen und -feuchten vorgegeben werden, falls Tagesgänge gerechnet werden sollen. Da die bereits bei der "Dynamik" als fehlend erwähnten Modelleigenschaften auch für die Simulation von Phänomenen im Bereich "Thermodynamik" erforderlich sind, gelten hierfür die gleichen Einschränkungen wie für den Bereich "Dynamik". Werden die dort aufgeführten Modelleigenschaften ergänzt und die Boussinesq-Approximation bzw. die Kontinuitätsgleichung für konvektive Prozesse angepaßt, so enthalten die numerischen Modelle alle für die *Basisvalidierung* erforderlichen Modelleigenschaften.

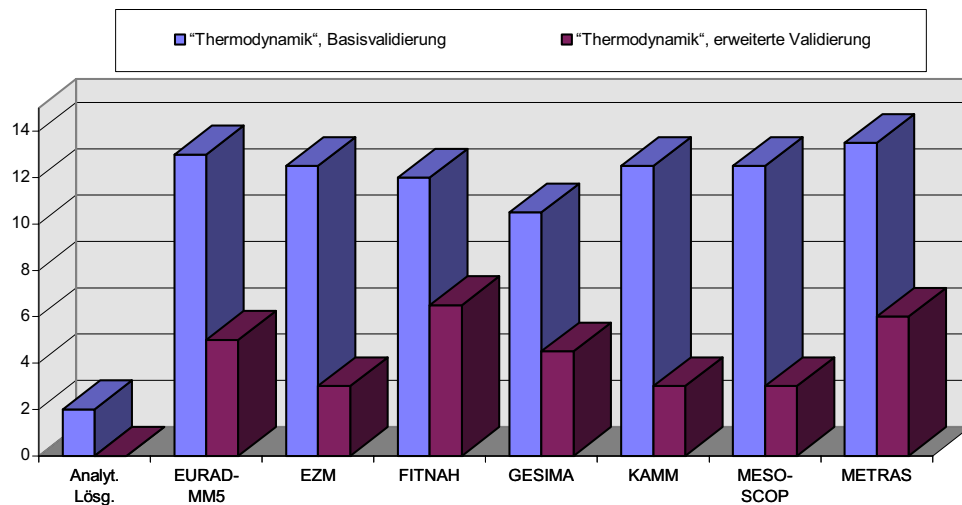


Abbildung 5-2 Gegenüberstellung von analytischer Lösung und verschiedenen hochauflösenden Regionalmodellen auf Basis des Validierungskriteriums "Vollständigkeit", Bereich "Thermodynamik" (15 Modelleigenschaften sind für die *Basisvalidierung* erforderlich, für die *erweiterte Validierung* sind bis zu 9 zusätzliche Eigenschaften notwendig (insgesamt 24)).

Hinsichtlich der *erweiterten Modellvalidierung*, für die nach dem Validierungskonzept zusätzliche Modelleigenschaften erforderlich sind, sind die Unterschiede zwischen den Modellen größer, da diese Eigenschaften durch die speziellen Anwendungsbereiche der Modelle bestimmt werden. Bei einigen Modellen werden z.B. wolkenphysikalische Prozesse nicht parametrisiert (EZM, KAMM), wodurch damit verbundene Phänomene nicht simuliert werden können, oder die Eisphase wird bei der Wolkenbildung nicht berücksichtigt (FITNAH, METRAS). In den Modellen GESIMA, KAMM und MESOSCOPO werden die kurzwelligen Strahlungsflüsse in der Atmosphäre nicht berechnet. In einigen Modellen wird die Abschattung durch Berge nicht berücksichtigt (EURAD-MM5, EZM, GESIMA, MESOSCOPO), die für Modellrechnungen mit Tagesgang über stark topographisch gegliedertem Gelände bedeutsam ist. In den Modellen EURAD-MM5 und EZM ist es möglich, zeitabhängige großskalige Werte in den Modellrechnungen zu berücksichtigen (Nesting des Modells). Auch mit den Modellen FITNAH, GESIMA und KAMM sind bereits Modellrechnungen mit zeitabhängigen großskaligen Werten durchgeführt worden; für das Modell METRAS wird ein Nesting-Verfahren gegenwärtig erprobt.

Keines der betrachteten Modelle weist alle nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" für die *erweiterte Validierung* der "Thermodynamik" erforderlichen Modelleigenschaften auf. Daher lässt sich keines der hier betrachteten Modelle auf sämtliche thermodynamischen Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ anwenden. Statt dessen sind die Modelle jeweils für die Simulation

bestimmter Phänomene der Skala besonders gut geeignet und parametrisieren dementsprechend vor allem die dafür relevanten Prozesse.

5.1.3 Bereich "Stoffdynamik"

Die für die Bereiche "Dynamik" und "Thermodynamik" aufgeführten Einschränkungen gelten auch für den Bereich "Stoffdynamik", für den die Modelleigenschaften der anderen Bereiche vorausgesetzt und zusätzlich stoffspezifische Eigenschaften erforderlich sind. Die numerischen Modelle weisen hinsichtlich der *Basisvalidierung* wieder ähnlich viele Eigenschaften auf. Die analytische Lösung, die keine Bilanzgleichung für Stoffe enthält, ist für Transportrechnungen ungeeignet.

Nach dem Validierungskonzept sollte ein hochauflösendes Regionalmodell für die *Basisvalidierung* im Bereich "Stoffdynamik" 17 Eigenschaften aufweisen, wobei neben den für die "Thermodynamik" notwendigen Eigenschaften zusätzlich 2 transportspezifische zu erfüllen sind (Abbildung 5-3). Einschränkungen ergeben sich bei den betrachteten Modellen vor allem hinsichtlich der Quellarten, da in den meisten Modellen z.B. nur kalte Volumen- oder Punktquellen, nicht aber alle nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" erforderlichen Quellarten berücksichtigt werden können. In Anbetracht der gegenwärtig verfügbaren Emissionskataster ist diese Unzulänglichkeit der Modelle aber ohne Bedeutung.

Die Unterschiede zwischen den numerischen Modellen, die, wie gesagt, jeweils für spezielle Anwendungszwecke entwickelt wurden, sind bei der *erweiterten Modellvalidierung* auch bei der "Stoffdynamik" größer als bei der *Basisvalidierung*. Einige Modelle enthalten z.B. keine für Partikel und Gase gültigen Ansätze zur Parametrisierung der trockenen Deposition (FITNAH, MESOSCOP). Ansätze für die nasse Deposition fehlen in den Modellen EZM, FITNAH, GESIMA, KAMM und MESOSCOP.

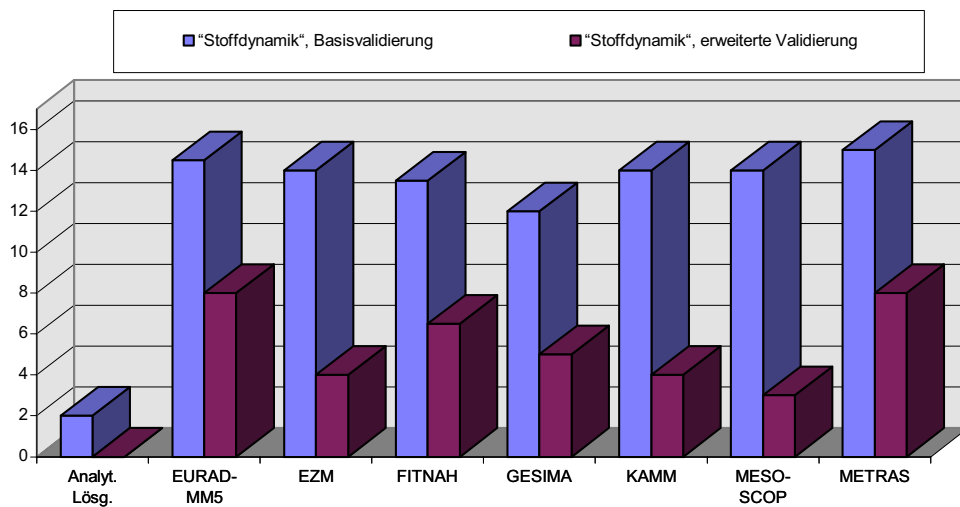


Abbildung 5-3 Gegenüberstellung von analytischer Lösung und verschiedenen hochauflösenden Regionalmodellen auf Basis des Validierungskriteriums "Vollständigkeit", Bereich "Stoffdynamik" (17 Modelleigenschaften sind für die *Basisvalidierung* erforderlich, für die *erweiterte Validierung* sind bis zu 11 zusätzliche Eigenschaften notwendig (insgesamt 28)).

In Anbetracht der verschiedenen Anwendungsbereiche enthält keines der hier gegenübergestellten hochauflösenden Regionalmodelle alle Eigenschaften, die nach dem Validierungskriterium "Vollständigkeit" für die Simulation beliebiger atmosphärischer Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ erforderlich wären. Einige Modelle enthalten aber im Vergleich zu anderen mehr Eigenschaften. Allerdings kann aus der Anzahl der Eigenschaften nicht ohne weiteres auf die Güte des Modells geschlossen werden. Die Modelle mit den meisten Eigenschaften liefern nämlich nicht notwendigerweise auch bei allen Modellanwendungen die realitätsnächsten Ergebnisse. Um die Qualität der Modellergebnisse abschätzen zu können, müßten die fünf Validierungskriterien auf die gegenübergestellten Modelle angewandt werden und vor allem die Ergebnisse der Anwendungstests betrachtet werden. Für spezielle Modellanwendungen müßte dann geprüft werden, welches der validierten Modelle dafür am geeignetsten ist.

Abschließend sei auch noch einmal darauf hingewiesen, daß die Modelle im wesentlichen mit ihrem Entwicklungsstand vom April 1994 herangezogen wurden. Inzwischen erfolgte Weiterentwicklungen wurden, mit Ausnahme von Eppel et al. (1995) und Lüpkes und Schlünzen (1995), nicht berücksichtigt.

5.2 Stand der Validierung am Beispiel des Modells METRAS

Das in Kapitel 4 vorgestellte Validierungskonzept wird im Bereich *Basisvalidierung* mit allen Kriterien auf das mesoskalige Transport- und Strömungsmodell METRAS angewandt. METRAS weist, wie in ANHANG I ausgeführt, für einige Parametrisierungen, numerische Verfahren und Randbedingungen Wahlmöglichkeiten auf (z.B. Turbulenzparametrisierung, Berechnung der bodennahen Flüsse bei subskaligen Bodeneigenschaften, Nahfeldmodell). Das hier zur Validierung herangezogene Modell besitzt folgende Konfiguration in den optionalen Bereichen:

- Turbulenzparametrisierung nach Holtslag und Moeng (1991) für labile Schichtung und Mischungswegansatz für stabile Schichtung (alternative Möglichkeiten: Mischungswegansatz, oder Dunst (1980))
- Parametermittlung für bodennahe Flüsse (alternative Möglichkeit: Blendhöhenkonzept)
- keine Wolken (alternative Möglichkeit: Wolkenparametrisierung mit Kessler-Schema)
- keine Berechnung der Strahlungsflüsse in der Atmosphäre (alternative Möglichkeit: 2-Strom-Approximation)
- Initialisierung über 1-d-Modell (alternative Möglichkeit: Nesting)
- direkte Quellberücksichtigung (alternative Möglichkeit: Nahfeldmodell)
- inerte Tracer (alternative Möglichkeit: EMEP- oder CHEMSAN-Chemie)
- Filter über 7 Punkte, zu jedem Zeitschritt für den Wind (alternative Möglichkeit: weniger Punkte oder seltener filtern, Filtern der thermodynamischen Größen)
- Absorbierende Schichten mit Faktor 0.4 für a_α in Gleichung (I-1) (alternative Möglichkeit: andere Werte für a_α)

Die *Basisvalidierung* wird für eine Konfiguration des Modells METRAS durchgeführt, die bereits länger genutzte Teile enthält (z.B. Approximationen, Numerik, Integrationsablauf), bezüglich der Turbulenzparametrisierung, der Festlegung der Rauigkeitslängen für Wärme und Impuls, sowie der absorbierenden Schichten und der Filterung aber eine gegenüber älteren Versionen (z.B. Schlünzen, 1988a, 1990; Wu und Schlünzen, 1992; Niemeier und Schlünzen, 1993) geänderte Modellphysik und -numerik aufweist, die beide die Ergebnisse des Modells beeinflussen. Für die *Basisvalidierung* wird eine Modellkonfiguration betrachtet, die die Grundversion von METRAS für erweiterte Modellkonfigurationen bildet (genestetes Modell, Nahfeldmodell, feuchte Thermodynamik). Sollen andere Konfigurationen des Modells validiert werden (z.B. eine andere Turbulenzparameterisierung), so müssen die nach dem Validierungskonzept erforderlichen Prüfungen dafür erneut erfolgen.

Für die *Basisvalidierung* müssen alle fünf Kriterien des Validierungskonzeptes erfolgreich geprüft werden, damit METRAS als validiert gelten kann. In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Kriterien auf das Modell in der oben beschriebenen Konfiguration angewandt.

5.2.1 Vollständigkeit des Modells METRAS

In Abschnitt 5.1 ist dieses Validierungskriterium bereits auf das Modell angewandt worden. Die jetzt zu prüfende Konfiguration des Modells METRAS enthält viele der für die *Basisvalidierung* in den Bereichen "Dynamik", "Thermodynamik" und "Stoffdynamik", erforderlichen Modelleigenschaften. Für den gewählten Diffusionskoeffizienten sind auch die Flüsse im Übergangsbereich zwischen Prandtlschicht und darüber befindlicher Grenzschicht stetig. Allerdings wird der Diffusionskoeffizient für skalare Größen als Vektor und nicht, wie nach Gleichung (2-35) erforderlich, als Tensor 2. Stufe oder als Skalar festgelegt. Auch Flächen- und Linienquellen können in METRAS nicht berücksichtigt werden.

Einige der Eigenschaften, die nur für bestimmte Modellanwendungen erforderlich sind, sind ebenfalls in der zu prüfenden Modellkonfiguration enthalten (z.B. Wolkenparametrisierung, Strahlungsparametrisierung, Konvektionsparametrisierung, Abschattung durch Berge, trockene und nasse Deposition, Nesting des Modells, Nahfeldmodell). Mit Ausnahme der Konvektionsparametrisierung, die in der zu prüfenden Modellkonfiguration als Turbulenzparametrisierung für instabile Schichtung verwendet wird, werden diese Eigenschaften aber bei der *Basisvalidierung* nicht berücksichtigt und auch nicht geprüft.

5.2.2 Nachvollziehbarkeit des Modells METRAS

Dieses Kriterium des Validierungskonzeptes bezieht sich auf die Prüfbarkeit des Modells durch Dritte. Das Kriterium wird auf METRAS in der zuvor beschriebenen Konfiguration angewandt (Tabelle 5-1). Daher dürfen nur Veröffentlichungen herangezogen werden, die sich im wesentlichen auf diese Konfiguration beziehen. Veröffentlichungen, bei denen im Modell z.B. andere Approximationen, Parameterisierungen oder numerische Verfahren genutzt werden, dürfen nicht berücksichtigt werden, da hierdurch ein anders konfiguriertes Modell entstehen würde. Buchartikel, Tagungsbeiträge, Institutsberichte, Diplomarbeiten oder Projektberichte dürfen aufgrund der

verminderten externen Prüfung dieser Artikel nicht als begutachtete Veröffentlichungen herangezogen werden.

	Dynamik	Thermodynamik	Stoffdynamik
Dokumentation allgemein zugänglich	Schlünzen et al. (1994a)		
Programmcode Dritten zugänglich	Das Modell wird nach Rücksprache für Forschungszwecke weitergegeben und z.Zt. betrieben am: Meteorologischen Institut, Universität Hamburg Inst. f. Troposphärenforschung, Leipzig [†] Inst. f. Atmosphärische Umweltforschung, Fraunhofer Institut, Garmisch-Partenkirchen Alfred-Wegener-Institut f. Polar- u. Meeresforschung, Bremerhafen Inst. f. Physical Oceanography, Ocean University of Qingdao, VR China [†] Dep. Mech. Eng., Univ. of Science and Technology, HongKong [†]		
Veröffentlichungen in begutachteten meteorologischen Fachzeitschriften	Lüpkes und Schlünzen (1995) Schlünzen et al. (1995) et al. (1995)		Schrum
Veröffentlichung der Modellvalidierung	vorliegende Arbeit		

Tabelle 5-1 *Basisvalidierung*, Kriterium "Nachvollziehbarkeit" am Beispiel der hier betrachteten Konfiguration des Modells METRAS.

In Tabelle 5-1 sind die Prüfpunkte der Tabelle 4-4 mit entsprechenden Hinweisen zum Modell METRAS ausgefüllt worden. Der erste Prüfpunkt (Dokumentation allgemein zugänglich) ist nur teilweise erfüllt. Zwar existiert eine allgemeine Modelldokumentation, darin ist die hier zu validierende Konfiguration des Modells aber nicht vollständig beschrieben. Ansonsten ist das Modell ausführlich dokumentiert und wird an verschiedenen Institutionen betrieben und dort teilweise auch weiterentwickelt. Der zweite Prüfpunkt (Programmcode Dritten zugänglich) wird damit erfüllt. Beim dritten Prüfpunkt (Veröffentlichungen in begutachteten Fachzeitschriften) kann die hier zu validierende Konfiguration des Modells nicht als vollständig geprüft gelten, da die Artikel aus 1995, die hier zu prüfende neue Teile des Modells beschreiben, gegenwärtig noch nicht veröffentlicht sind.

* Die Modellbeschreibung ist noch nicht um die hier getestete Turbulenzparameterisierung erweitert worden.

† An dieser Institution wird das Modell in einer anderen Konfiguration betrieben.

5.2.3 Realisierungsgüte des Modells METRAS

Die einzelnen Prüfpunkte, die die Grundversion von METRAS für das Validierungskriterium "Realisierungsgüte" erfüllen muß, sind in Tabelle 4-5 aufgeführt. Wie Tabelle 5-2 deutlich macht, erfüllt das Modell die meisten Prüfpunkte. Allerdings fehlt ein Datenflußdiagramm, das zum Verständnis des Modells erforderlich ist. Daher kann METRAS bezüglich dieses Validierungskriteriums ebenfalls nur als teilweise validiert gelten.

	Dynamik	Thermodynamik	Stoffdynamik
Standard einer Programmiersprache	FORTRAN 77		
Programmierkonventionen	eigene, dokumentierte Konvention		
Variablenverzeichnis	Teil der Modelldokumentation (Schlünzen et al., 1994)		(Schlünzen et al., 1994)
Datenflußdiagramm	- fehlt -		
Funktionsablaufdiagramm	Teil der Modelldokumentation (Schlünzen et al., 1994)		
Automatische Konsistenzprüfung (Parametrisierungen, Felddimensionen)	Parametersetzung, Felddimensionen, Modellkonfiguration werden geprüft		

Tabelle 5-2 *Basisvalidierung*, Kriterium "Realisierungsgüte" am Beispiel der hier betrachteten Konfiguration des Modells METRAS.

5.2.4 Ergebnissgüte des Modells METRAS

In Tabelle 4-6 sind 6 verschiedene Anwendungstests aufgeführt, die mit einem hochauflösenden Regionalmodell erfolgreich durchgeführt werden sollten, damit dieses im Rahmen einer *Basisvalidierung* das Validierungskriterium "Ergebnissgüte" erfüllt. Die Anwendungstests erfordern fünf verschiedene Modellgebiete. Der erste Satz von Modellrechnungen umfaßt die unter Abschnitt 3.2 aufgeführten Modellanwendungen, der 2. Satz die Bergüberströmungen (Abschnitt 3.3.1). Die drei Modellrechnungen der Abschnitte 3.4.1, 3.3.2, 3.5.1 erfordern weitere Modellgebiete. Mit Ausnahme der Anwendungstests 3.3.2, 3.5.1 sind die für eine *Basisvalidierung* erforderlichen Modellanwendungen mit METRAS in der zu prüfenden Konfiguration durchgeführt worden. Die Ergebnisse der Modellrechnungen werden nachfolgend entsprechend ihrer Zuordnung zu den einzelnen Bereichen vorgestellt ("Dynamik", "Thermodynamik", "Stoffdynamik"). Bei allen Modellrechnungen ist eine "Ergebniskontrolle" entsprechend Tabelle 4-7 erfolgt.

5.2.4.1 Modellanwendungen zur Basisvalidierung der Dynamik

Zur *Basisvalidierung* der Dynamik des Modells sind fünf Simulationen über homogenem Gelände (Modellrechnungen 3.2.1) und drei über topographisch gegliedertem Gelände erforderlich (Modellrechnungen 3.3.1). Wie im folgenden gezeigt werden wird, sind die Anwendungstests erfolgreich durchgeführt worden, so daß METRAS in Hinblick auf die Anwendungstests im Bereich "Dynamik" nach dem vorgeschlagenen Validierungskonzept validiert ist.

Windprofile über homogenem Gelände

Für die Modellanwendungen wird METRAS entsprechend Tabelle 3-1 initialisiert. Das Vertikalgitter ist bis in eine Höhe von 60 m über Grund äquidistant, darüber nimmt die vertikale Gitterweite von 20 m bis auf 1000 m zu, der Gitterspreizungsfaktor beträgt 1.175. Damit ergeben sich vertikal 29 und horizontal, entsprechend der vorgegebenen Gitterstruktur (vgl. Tabelle 3-1), in jede Richtung 4 Gitterpunkte. Während der ersten 20 Minuten der Modellsimulation wird die Poissongleichung genauer gelöst, um anfängliche Störungen durch nicht angepaßte Anfangswerte zu vermindern. Das bei Ost-Anströmung errechnete Windprofil für $\varphi = 50^\circ$ Nord wird als Vergleichsprofil herangezogen. Von diesem müssen die Abweichungen der auf die Ost-Anströmung normierten Ergebnisse der anderen 4 Modellrechnungen unterhalb der in Abschnitt 3.2.1 angegebenen Abweichungen liegen. In Tabelle 5-3 sind die Maximalabweichungen für die einzelnen Modellläufe aufgeführt. Alle liegen unterhalb der zulässigen Fehler. Damit ist das Modell bezüglich dieser Anwendungen validiert.

	D_{\max} (Windbetrag) [m/s]	D_{\max} (Windrichtung) [°]	D_{\max} (Temperatur) [K]*
Zulässige Abweichung	0.01	0.1	10^{-10}
Südhalbkugel	$0.14 \cdot 10^{-3}$	$0.11 \cdot 10^{-2}$	$0.25 \cdot 10^{-10}$
West-Wind	$0.41 \cdot 10^{-3}$	$0.49 \cdot 10^{-2}$	$0.24 \cdot 10^{-10}$
Nord-Wind	$0.18 \cdot 10^{-3}$	$0.33 \cdot 10^{-2}$	$0.16 \cdot 10^{-10}$
Süd-Wind	$0.45 \cdot 10^{-3}$	$0.56 \cdot 10^{-2}$	$0.25 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 5-3 Maximale Abweichungen zwischen verschiedenen Modellergebnissen für die Modellanwendungen 3.2.1 (Windprofile über homogenem Gelände) nach 6 Stunden Simulationszeit.

Überströmung eines Berges

Für diese Modellanwendungen wird METRAS entsprechend Tabelle 3-2 initialisiert. Wie bei den Modellanwendungen über homogenem Gelände beträgt der vertikale Gitterspreizungsfaktor 1.175, insgesamt werden vertikal 32 Gitterpunkte verwendet. Die Diastrophie wird über 10 Minuten durchgeführt. Abbildung 5-4 zeigt einen Vertikalschnitt der Modellergebnisse für die u- und die w-Komponente des Windes bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s. Deutlich ist die verminderte Windgeschwindigkeit aufgrund der bodennahen Reibung zu erkennen (vgl. Abbildung 3-1). Die absorbierenden Schichten im oberen Bereich des Modellgebietes sorgen für eine effektive Dämpfung der ausgelösten Leewellen. Gegenüber früheren Modellergebnissen wirken die veränderten absorbierenden Schichten effektiver und beeinflussen die Lösung des Modells in der gesamten oberen Modellhälfte. Trotz dieses intensiven Einflusses liegt der Korrelationskoeffizient von numerischer und analytischer Lösung nach 9 Stunden Simulationszeit im Bewertungsbereich zwischen 1000 m und 6000 m oberhalb von 0.9 (Tabelle 5-4). Die maximale Abweichung der mit dem numerischen Modell berechneten v-Komponente des Windes beträgt 0.24 m/s und liegt damit ebenfalls unterhalb der Fehlergrenze von 0.5 m/s. Die vertikale Wellenlänge der Leewelle kann aus Abbildung 5-4 zu etwa 4500 m ermittelt werden und weicht damit weniger als 25 % von der nach der analytischen Lösung berechneten Wellenlänge ab.

* Die Rechnergenauigkeit beträgt 14 Ziffern auf einer CRAY C90, auf der die Modellrechnungen durchgeführt wurden.

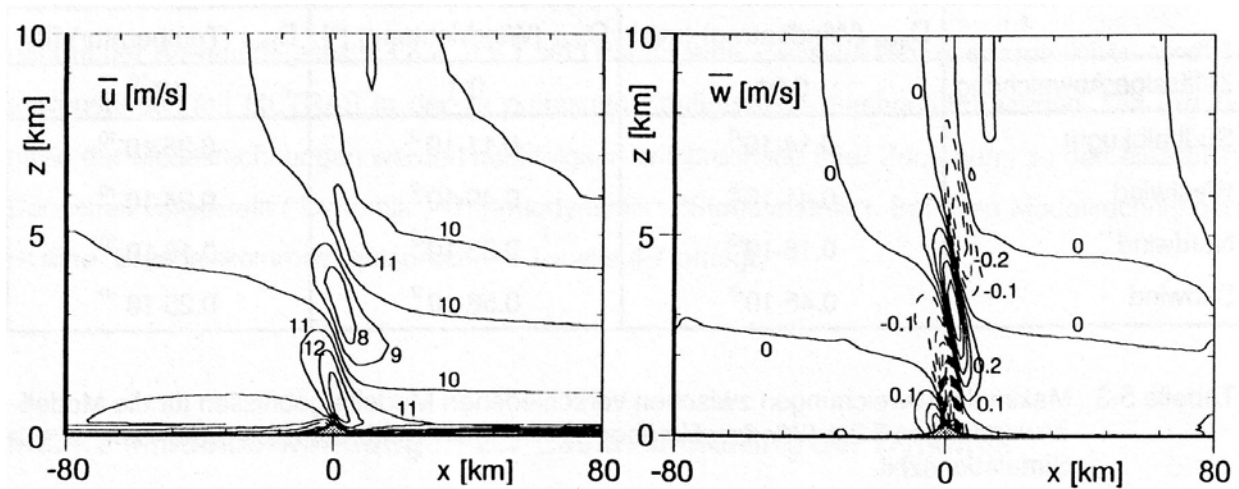


Abbildung 5-4 Mit METRAS modellierte u-Komponente des Windes (links, Isolinienabstand 1 m/s) und Vertikalwind (rechts, Isolinienabstand 0.1 m/s) entsprechend Modellanwendung 3.3.1 bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s nach 9 Stunden Simulationszeit.

Die Modellrechnung bei halbiertem großskaliger Windgeschwindigkeit liefert eine etwa halbierte Wellenlänge der Leewelle und ist ebenfalls zur analytischen Lösung ausreichend korreliert (Tabelle 5-4). Die maximale Abweichung der v-Komponente des Windes beträgt 0.45 m/s und liegt damit noch unterhalb der vorgegebenen Fehlergrenze. Würde mit noch geringerer großskaliger Windgeschwindigkeit gerechnet, so hätte die Lösung eine noch ausgeprägtere Wellenstruktur. Die Annahme linearer Verläufe der analytischen Lösung wäre dann innerhalb eines Gittervolumens noch weniger zutreffend und der Vergleich von Modellergebnis und analytischer Lösung könnte nicht mehr auf die erfolgte einfache Weise durchgeführt werden (vgl. Abschnitt 3.3.1).

Die Modellrechnung mit neutraler atmosphärischer Schichtung zeigt in Luv des Bergrückens Auf- und in Lee Abwinde, wie es nach der analytischen Lösung auch zu erwarten ist. Die entstehende Potentialströmung ist über dem Berg beschleunigt. Die Korrelationskoeffizienten und die maximale Abweichung der v-Komponente des Windvektors von Null liegen im Rahmen der zulässigen Fehler (siehe Tabelle 5-4).

Modellanwendung	Fehlermaß	Erwartungswert	Modellergebnisse (Auswertebereich 1000 bis 6000 m)
stabile Schichtung, geostrophischer Wind 10 m/s	λ_b	4830 ± 1210 m	4500 m
	R_u	≥ 0.9	0.99
	R_w	≥ 0.9	0.96
	R_θ	≥ 0.9	0.99
	$D_{\max}(v)$	< 0.5 m/s	0.24 m/s
stabile Schichtung, geostrophischer Wind 5 m/s	λ_b	2415 ± 605 m	2600 m
	R_u	≥ 0.9	0.99
	R_w	≥ 0.9	0.95
	R_θ	≥ 0.9	0.99
	$D_{\max}(v)$	< 0.5 m/s	0.45 m/s
neutrale Schichtung, geostrophischer Wind 10 m/s	R_u	≥ 0.9	0.99
	R_w	≥ 0.9	0.90
	$D_{\max}(v)$	< 0.5 m/s	0.12 m/s

Tabelle 5-4 Ergebnisse der Bergüberströmungen im Vergleich zu den Erwartungswerten nach 9 Stunden Simulationszeit.

Insgesamt wird der Prüfpunkt "Ergebnisgüte" für den Bereich "Dynamik" beim METRAS-Modell in der hier zu prüfenden Konfiguration als erfüllt angesehen. Die Abweichungen zwischen Modellergebnissen und analytischer Lösung liegen bei beiden Anwendungstests unterhalb der zulässigen Fehler.

5.2.4.2 Modellanwendungen zur Basisvalidierung der Thermodynamik

Zur *Basisvalidierung* der "Thermodynamik" sind nach dem Validierungskonzept neben den Anwendungstests für den Bereich "Dynamik" zwei weitere Simulationen durchzuführen. Die Land-See-wind Zirkulation ist so modelliert worden, daß eine Übersättigungen zulässig und eine relative Feuchte von mehr als 110% möglich war. Dazu wurde die "Ergebniskontrolle" in diesem Prüfpunkt außer Kraft gesetzt wurde (vgl. Tabelle 4-7). Die Ergebnisse der Modellrechnung sind in Tabelle 5-5 zusammengefaßt.

Zeit	Position der Seewindfront	
	Erwartungswerte (aus Messungen)	Modellergebnisse
12 Uhr	10 ± 6 km	7 km
16 Uhr	35 ± 16 km	20 km
20 Uhr	70 ± 36 km	39 km
Zeitintervall	Verlagerungsgeschwindigkeit der Seewindfront	
12 bis 16 Uhr	$\approx 1.6 \pm 0.8$ m/s	0.9 m/s
16 bis 20 Uhr	höher als zwischen 12 und 16 Uhr*	1.3
Zeit	Maximaler Vertikalwind in der Front	
12 Uhr	-	0.12 m/s
16 Uhr	-	0.27 m/s
20 Uhr	-	0.37 m/s

Tabelle 5-5: Modellergebnisse und Erwartungswerte für eine Seewindzirkulation ohne Wolkeneinfluß.

Die Modellergebnisse liegen am unteren Rand der Erwartungswerte für die Position der Seewindfront. Dieses ist insofern nicht überraschend, als bei dieser Simulation Wolkeneinflüsse fehlen. Die typischen Tendenzen bei einer Seewind Zirkulation (höhere Verlagerungsgeschwindigkeit am späten Nachmittag als am frühen Nachmittag, beschleunigte Inlandverlagerung) werden von den Modellergebnissen wiedergegeben. Damit ist auch diese Modellrechnung erfolgreich durchgeführt worden.

Die *Basisvalidierung* der "Thermodynamik" ist noch nicht vollständig erfolgt, da dazu noch der Vergleich zwischen den Wangara-Daten (Anwendungstest 3.5.1) und den Ergebnissen des METRAS-Modells in der hier zu validierenden Konfiguration durchzuführen ist.

5.2.4.3 Modellanwendungen zur Basisvalidierung der Stoffdynamik

Zur *Basisvalidierung* der Stoffdynamik von METRAS sind nach dem Validierungskonzept zusätzlich Simulationen über flachem Gelände mit homogener Bodennutzung erforderlich (Modellrechnungen 3.2.2, 3.3.2). Die Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher Quellstärken auf die

* Nach den Messungen beträgt die Verlagerungsgeschwindigkeit der Seewindfront $U_{front} \approx 2.6 \pm 0.8$ m/s. In diesem Wert sind Wolkeneinflüsse enthalten.

Modellergebnisse zeigt eine maximale Abweichung, die unterhalb der zulässigen liegt. Der Vergleich mit der analytischen Lösung nach dem Gaußmodell ist noch nicht erfolgt. Damit ist METRAS für den Bereich "Stoffdynamik" nach dem vorgeschlagenen Validierungskonzept nicht validiert.

5.2.5 Ergebniskontrolle des Modells METRAS

Die kontinuierliche Kontrolle der Qualität der Modellergebnisse erfolgte bei allen Anwendungstests, deren Ergebnisse in den vorigen Abschnitten vorgestellt wurden. In Tabelle 4-7 sind die einzelnen Prüfpunkte dieses Kriterium zusammengefaßt, deren Ergebnisse hier exemplarisch für eine Bergüberströmung bei stabiler Schichtung mit einem geostrophischen Wind von 10 m/s dargestellt werden sollen.

Abbildung 5-5 zeigt die Zeitserie der Komponenten des Windvektors (\bar{u} , \bar{v} , \bar{w}) und der mesoskaligen Temperaturabweichung ($\tilde{\theta}$) am Kontrollgitterpunkt. In der ersten halben Stunde ist deutlich der Einfluß der Anfangswerte auf die Modellergebnisse zu erkennen. Die während der ersten zehn Minuten der Modellrechnung stattfindende Diastrophie entspricht einem zusätzlichen Forcingterm im Differentialgleichungssystem, dessen Auswirkung in der Zeitserie deutlich sichtbar wird. Nach etwa zwei Stunden sind die Modellergebnisse von Störungen in den Anfangswerten weitgehend unabhängig.

$2\Delta t$ - Wellen sind in den Modellergebnissen nicht zu erkennen, so daß von einer stabilen zeitlichen Integration ausgegangen werden kann. Die Abbildung 5-6 zeigt für die gleiche Modellanwendung die Gebietsmittelwerte als Funktion der Zeit. Auch für die über das Modellgebiet gemittelten Größen (\bar{u}^{\square} , \bar{v}^{\square} , \bar{w}^{\square} , $\bar{\theta}^{\square}$) sind in der Zeitserie monotone Zu- oder Abnahmen oder $2\Delta t$ - Wellen nicht zu erkennen*. Die maximale Standardabweichung befindet sich in x-Richtung in der Mitte des Modellgebietes über dem Berg (nicht dargestellt). Sie ist physikalisch bedingt und nicht durch fehlerhafte Randwerte ausgelöst. Analoges gilt für die vertikale Position der maximalen Standardabweichung. In y-Richtung befinden sich die maximalen Standardabweichungen am Nord- oder Südrand des Modellgebietes. Vertikalschnitte an diesen Gitterpunkten zeigen, daß $2\Delta x$ - oder $3\Delta x$ -Wellen dabei nicht entstehen.

* Die stufenförmige Abnahme der Temperatur ist durch die formatierte Ausgabe der Modellergebnisse bedingt, tatsächlich sind die Übergänge stetig.

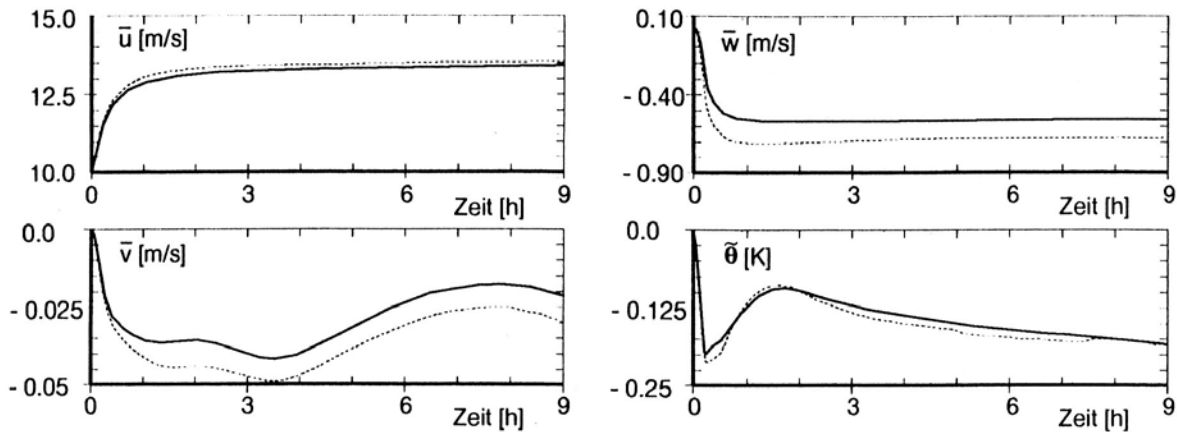


Abbildung 5-5 Zeitserien am Kontrollgitterpunkt für die Bergüberströmung bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s. Durchgezogene Linien stellen die Modellergebnisse für die einfache, gestrichelte Linien für die doppelte Horizontalaufösung dar.

Wie bei anderen Modellanwendungen mit METRAS wird routinemäßig eine Prüfung der Einzelwerte der Modellergebnisse an jedem Gitterpunkt und zu jedem Zeitschritt durchgeführt. Hierbei haben sich keine Besonderheiten gezeigt, zu keinem Zeitpunkt der Integration sind in den Anwendungstests an irgendeinem Gitterpunkt Werte außerhalb der Plausibilitätsgrenzen (vgl. Tabelle 4-7) und damit unglaubliche Werte berechnet worden.

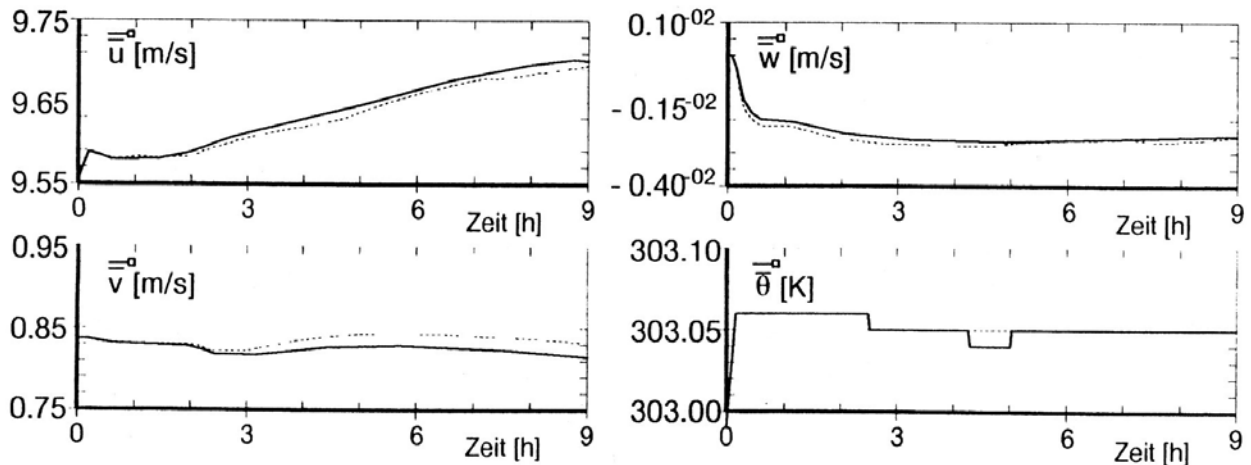


Abbildung 5-6 Zeitserien von Gebietsmittelwerten für die Bergüberströmung bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s. Durchgezogene Linien stellen die Modellergebnisse für die einfache, gestrichelte Linien für die doppelte Horizontalaufösung dar.

Die Ergebnisse der Modellrechnung mit doppelter Horizontalaufösung sind zum Vergleich mit den Modellergebnissen, die mit einfacher Auflösung erzielt wurden, in Abbildung 5-5 am Kontrollpunkt

und in Abbildung 5-6 als Gebietsmittelwerte, jeweils als Zeitserien, dargestellt (gestrichelte Linien). Die Abweichungen der Gebietsmittelwerte sind gering, sie liegen unterhalb von 1 cm/s bzw. 0.1°K. Am Kontrollpunkt sind die Abweichungen höher, sie liegen aber unterhalb der nach Tabelle 4-7 zulässigen maximalen Abweichungen. Die gute Übereinstimmung ist nicht überraschend, da bei der für die Modellrechnung vorgegebenen homogenen Bodennutzung und bei stabiler Schichtung kleinräumige atmosphärische Phänomene nicht entstehen. Bei instabiler atmosphärischer Schichtung und inhomogener Bodennutzung sind die Unterschiede zwischen Modellergebnissen verschiedener Horizontalauflösung größer.

Die Ergebnisprüfung der Modellergebnisse ist im Vergleich zur analytischen Lösung erfolgt und bereits in Abschnitt 5.2.4.1 dargestellt worden. Das Modell ist für diesen Anwendungstest verifiziert.

Die "Ergebniskontrolle" ist hier beispielhaft anhand der Bergüberstömung bei stabiler Schichtung gezeigt worden. Auch für die anderen in Abschnitt 5.2.4 beschriebenen Modellanwendungen sind alle Prüfpunkte des Validierungskriteriums "Ergebniskontrolle" erfüllt. Damit erfüllt das Modell für die durchgeführten Anwendungen das Kriterium "Ergebniskontrolle".

5.2.6 Zusammenfassende Bewertung

Wie in den Abschnitten 5.2.2 bis 5.2.5 ausgeführt, erfüllt METRAS in der hier geprüften Konfiguration in weiten Teilen die Kriterien der *Basisvalidierung*. Allerdings sind in vielen Prüfpunkten Unzulänglichkeiten zu finden, die eine vollständige *Basisvalidierung* nicht erlauben. Die Modelleigenschaften weisen Mängel bei der Turbulenzparametrisierung (K_{xij}) und bei der Vielfalt der Quellen auf. Für eine vollständige "Nachvollziehbarkeit" des Modells fehlen gegenwärtig noch Veröffentlichungen in begutachteten Fachzeitschriften, in denen die neue Parametrisierung beschrieben wird. Die Modellbeschreibung muß um die neuen Modellcharakteristiken erweitert werden. Das Validierungskriterium "Realisierungsgüte" kann nur dann als erfüllt angesehen werden, wenn für das Modell auch ein Datenflußdiagramm vorhanden ist.

Mit der zu validierenden Konfiguration von METRAS sind vier der erforderlichen sechs Anwendungstests erfolgreich durchgeführt worden. Ist auch der Vergleich mit den Wangara-Daten und mit dem Gauß-Modell abgeschlossen, so erfüllt das Modell das Kriterium "Ergebnisgüte" für eine *Basisvalidierung*. Die "Ergebniskontrolle" ist für die bereits durchgeführten Anwendungstests erfolgreich vorgenommen worden. Dieses gilt auch für andere, nicht im Rahmen des Validierungskonzeptes erfolgte Modellanwendungen.

Die durchgeführten Modellrechnungen zeigen einen starken Einfluß der neu formulierten absorbierenden Schichten auf die Modellergebnisse in der oberen Hälfte des Modellgebietes. Dieser führt dazu, daß für realitätsnahe Modellanwendungen ein höher reichendes Modellgebiet erforderlich wird, als dieses bisher nötig war. In Hinblick auf den mit großen Modellgebieten verbundenen Speicherplatz- und Rechenzeitbedarf des Modells soll zukünftig die Intensität der absorbierenden Schichten vermindert werden. Dieses ist allerdings nur sinnvoll, wenn weniger stark absorbierende Schichten eine ausreichende Absorption von Wellen am Modelloberrand bewirken und gleichzeitig zur Anpassung der Modellergebnisse an die dort vorgegebenen großskalige Werte führen. Da veränderte absorbierende Schichten die Lösung des Modells beeinflussen, müssen bei reduzierten Anpassungskoeffizienten alle Tests wiederholt werden.

6 Schlußbemerkungen

Die Komplexität hochauflösender Regionalmodelle ist so weit fortgeschritten, daß ihre Ergebnisse nicht mehr durch einfache Plausibilitätsüberlegungen auf ihre Richtigkeit hin beurteilt werden können. Daher haben die verschiedenen, mit hochauflösenden Regionalmodellen arbeitenden Gruppen jeweils eigene Systeme zur Ergebniskontrolle entwickelt. Insbesondere werden Modell-ergebnisse - soweit möglich - mit Messungen verglichen. Diese Vorgehensweise kann aber nur einen Teilaspekt einer allgemeinen Validierung der Modelle abdecken und ist notgedrungen subjektiv. In dieser Arbeit ist ein Konzept vorgestellt worden, das die subjektive Ergebniskontrolle zu objektivieren versucht und sie als ein Kriterium in ein geschlossenes Validierungskonzept aufnimmt.

Mit dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen fünf-teilige Validierungskonzept können hochauflösende Regionalmodelle validiert werden. Dabei erfolgt neben einem Vergleich von Modellergebnissen mit analytischen Lösungen, anderen Modellergebnissen und Messungen (Validierungskriterium "Ergebnisgüte", Abschnitt 4.2.4) auch eine Analyse des Modellkonzeptes und seiner Realisierung ("Vollständigkeit", "Realisierungsgüte"), wobei die in Kapitel 2 aufgeführten Grundlagen zur Modellierung atmosphärischer Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ die Entscheidungsgrundlage für die einzelnen Prüfpunkte bilden. Zu den weiteren Validierungskriterien des Konzeptes zählen die "Nachvollziehbarkeit" des Modells durch Dritte und die "Ergebniskontrolle". Das letztgenannte Validierungskriterium erlaubt, auch bei der Simulation vorher nicht bekannter atmosphärischer Phänomene die Güte der Modellergebnisse zu kontrollieren (Plausibilitätsbereiche, doppelte Auflösung) und Defizite in der Modellphysik und Numerik ($2\Delta x$ -, $2\Delta t$ -Wellen) zu erkennen.

Um den unterschiedlichen Anwendungsbereichen atmosphärischer Modelle einigermaßen gerecht zu werden, wird im Konzept zwischen verschiedenen Phänomenursachen ("Dynamik", "Thermodynamik", "Stoffdynamik") unterschieden und werden dementsprechend unterschiedliche Anforderungen formuliert. Zusätzlich wird zwischen einer *Basisvalidierung* (nur ausgewählte Phänomene der Skala können simuliert werden) und der *erweiterten Validierung* (beliebige Phänomene der Skala können simuliert werden) unterschieden.

Die grobe Klassierung des Validierungskonzeptes nach typischen Modellanwendungsbereichen faßt verschiedene atmosphärische Phänomene in einem Bereich zusammen. Modelle, die beson-

ders gut zur Simulation bestimmter Phänomene geeignet sind (z.B. Simulation der Wolkenbildung), erfüllen oftmals nicht alle Kriterien eines Bereiches. Dadurch werden sie nach dem vorgeschlagenen Validierungskonzept schlechter bewertet, als es ihren Fähigkeiten entspricht. Diese Unzulänglichkeit des Validierungskonzeptes könnte ausgeräumt werden, indem es für mehr Bereiche entwickelt würde. Die Bereiche könnten sich an den zu simulierenden Phänomenen orientieren. Auf eine derartige Einteilung ist in dieser Arbeit verzichtet worden, da bei einer auf Phänomene bezogenen Einteilung alle in einer Skala entstehenden Phänomene bekannt sein müßten, wenn eine Validierung für eine bestimmte Skala erfolgen soll. Da dieses aber nicht der Fall ist (siehe Bemerkungen zur Verifikation in der Einleitung), wird hier, trotz gewisser Nachteile, die gröbere Einteilung in sechs Bereiche bevorzugt.

Wesentliche Voraussetzung für das vorgeschlagene Validierungskonzept ist es, daß alle Kriterien auf die gleiche Modellphysik angewendet werden. Andernfalls kann keine Gesamtaussage für das zu validierende Modell abgeleitet werden, da beispielsweise eine veränderte Parametrisierung der subskaligen turbulenten Flüsse zu quantitativ und qualitativ anderen Ergebnissen führen kann.

Ist ein hochauflösendes Regionalmodell nach dem hier vorgeschlagenen Validierungskonzept vollständig geprüft worden, so sollte es für die meisten Modellanwendungen in der Mesoskala- β und Mesoskala- γ realitätsnahe Ergebnisse liefern, die im Rahmen der in Kapitel 3 diskutierten Fehler liegen. Durch die "Ergebniskontrolle" ist das irrtümliche Verwenden unrichtiger Ergebnisse stark eingeschränkt. Nicht auszuschließen ist allerdings, daß, durch ungenaue Anfangswerte bedingt, die Lösungen des Modells andere Phänomene zeigen, als sie in der Natur gefunden werden (Abschnitt 2.6). Beim Validierungskonzept wird vorausgesetzt, daß die Anfangswerte weitgehend fehlerfrei sind und nur die zum Vergleich herangezogenen Messungen fehlerbehaftet sind. Die Auswirkung ungenauer Anfangswerte auf die Modellergebnisse müßte z.B. über statistische Modellrechnungen mit zufallsverteilten Anfangsfehlern geprüft werden. Sie ist nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Ebenso wenig ist das Validierungskonzept geeignet, die Qualität einzelner Parametrisierungen, numerischer Verfahren oder Randbedingungen zu bewerten. Dieses muß durch detaillierte und systematische Vergleiche mit Datensätzen erfolgen, die speziell für die Prüfung der zu testenden Modelleigenschaft geeignet sind.

Auch ein validiertes Modell kann, wie bereits in der Einleitung erwähnt, fehlerhafte Modellergebnisse liefern. Daher sind die Ergebnisse des Modells in jedem Fall mit Sachverstand zu betrachten, wenn möglich mit Messungen zu vergleichen und auf Plausibilität zu prüfen (Validierungskriterium "Ergebniskontrolle"). Das vorgestellte Validierungskonzept und insbesondere die anderen Prüfpunkte der "Ergebniskontrolle" vermindern zwar die Wahrscheinlichkeit, fehlerhafte Modell-

ergebnisse zu erhalten, sie können sie aber nicht gänzlich ausschließen. Daher ist eine Ergebnisprüfung immer erforderlich.

In Hinblick auf eine Übertragbarkeit des Konzeptes auf andere Skalen (z.B. globale Klimamodelle) ist anzumerken, daß die Struktur des Validierungskonzeptes übernommen werden kann, so wie es hier für die Mesoskala- β und Mesoskala- γ ausgeführt worden ist (Abschnitt 4.1). Die einzelnen Prüfpunkte (Abschnitt 4.2) müssen aber angepaßt werden. Da es sich bei globalen Klimamodellen meist um gekoppelte Ozean-Atmosphäre-Modelle handelt (z.B. Sausen et al., 1988), könnte das Validierungskonzept auch nicht auf das gekoppelte Modell, sondern nur auf den atmosphärischen Teil angewandt werden. Für das Ozeanmodell und das gekoppelte Modell müßten zusätzliche Kriterien entwickelt werden. Für das Atmosphärenmodell könnten die Validierungsteile "Nachvollziehbarkeit" (Tabelle 4-4) und "Realisierungsgüte" (Tabelle 4-5) weitgehend unverändert übernommen werden. Die "Ergebniskontrolle" (Tabelle 4-7) muß auf die Stratosphäre erweitert werden, oder für diese, mit anderen Wertebereichen, getrennt durchgeführt werden. Bezüglich der "Vollständigkeit" (Tabellen 4-2 und 4-3) müßten die Prüfpunkte an die Anwendungsskala des Modells angepaßt werden. Beispielsweise muß in einem globalen Modell die vollständige Kontinuitätsgleichung im Atmosphärenteil berücksichtigt werden. Gleichzeitig kann bei den großen Gitterweiten der globalen Modelle die hydrostatische Approximation genutzt und der Vertikalwind diagnostisch berechnet werden (z.B. Côté et al., 1993; McGregor et al., 1993). Bei den gegenwärtig neu entwickelten globalen Modellen, die ein nicht-äquidistantes Gitter verwenden, ist eine entsprechende Näherung nicht mehr zulässig, wenn sie zur Simulation von Phänomenen der Mesoskala- β und Mesoskala- γ genutzt werden. Die zweite, sehr wesentliche Anpassung des Validierungskonzeptes muß beim Validierungskriterium "Ergebnisgüte" (Tabelle 4-6) erfolgen.

Soll kein globales, sondern ein mikroskaliges Modell zur Simulation von Hindernisumströmungen getestet werden, so sind beispielsweise Vergleiche zu Windkanalmessungen als Anwendungstests für die "Ergebnisgüte" sinnvoll (z.B. Avissar et al., 1990). Die anderen Prüfpunkte des Validierungskonzeptes können dagegen weitgehend unverändert übernommen werden.

Das in dieser Arbeit vorgestellte Validierungskonzept ist somit nach Anpassung einzelner Kriterien auch auf atmosphärische Modelle anderer Skalen übertragbar. Neue wissenschaftliche Erkenntnisse und Weiterentwicklungen sowie für Validierungszwecke allgemein verfügbare Datensätze könnten auch für die betrachtete Skala Modifikationen der Validierungskriterien erforderlich machen, die vor allem die Prüfpunkte der Kriterien "Vollständigkeit" und "Ergebnisgüte" verändern würden. Dazu wird sicher auch die Diskussion des vorgeschlagenen Validierungskonzeptes beitragen, das ja nur dann als ein solches bezeichnet werden kann, wenn es wissenschaftlich anerkannt ist (vgl. Definitionen in der Einleitung zu dieser Arbeit).

Zukünftig wird es notwendig werden, auch ein allgemein nachvollziehbares Konzept zur Validierung von Transportmodellen mit chemischen Umsetzungen zu entwickeln. Gerade in hochauflösenden Regionalmodellen werden, ebenso wie in Klimamodellen, chemische Wechselwirkungen simuliert. Die Ergebnisse beider Modellgruppen fließen wesentlich in politische Entscheidungen ein (z.B. Sommer-Smog-Verordnung, Emissionsminderungsmaßnahmen). Daher sollte auch für chemische Prozesse bald ein ähnliches Konzept entwickelt werden, wie es hier für die dynamischen, thermodynamischen und stoffdynamischen Prozesse vorgeschlagen wird.

DANKSAGUNG

Mein Dank gilt zu allererst Prof. Schatzmann, der meine wissenschaftliche Arbeit seit vielen Jahren wohlwollend begleitet, unterstützt und gefördert hat und dadurch diese Arbeit ermöglicht hat. Besonders danke ich ihm für seine immer vorhandene Diskussionsbereitschaft, für konstruktive Vorschläge und für seine Offenheit. Alles trägt zu einer für mich sehr angenehmen Arbeitsatmosphäre bei.

Der "METRAS-Gruppe" in Hamburg und Anderswo danke ich für die gute, offene und freundschaftliche Zusammenarbeit, für Kritik, Witz und Ironie; es macht Spaß, gemeinsam zu arbeiten. Dieser Dank gebührt besonders Dr. Klaus Bigalke, mit dem ich seit vielen Jahren zusammenarbeite und dessen kritische Anmerkungen mir immer willkommene Denkansätze bieten.

An dieser Stelle möchte ich auch Prof. Dunst, Prof. Fraedrich, Prof. Grassl und allen anderen noch einmal besonders danken, die mit mir das Thema "Validierung hochauflösender Regionalmodelle" kontrovers diskutiert haben. Sie und viele andere innerhalb und außerhalb des Meteorologischen Instituts der Universität Hamburg haben dazu beigetragen, daß ich die vorliegende Arbeit geschrieben habe.

Dank geht auch an meine Freundinnen und Freunde und an meine Familie, deren Verständnis mir das Schreiben dieser Arbeit erleichtert hat. Günter Meschkat danke ich darüber hinaus auch für das Tippen großer Teile dieses Textes.

Dem Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie, dem Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung sowie der Universität Hamburg danke ich für die finanzielle Unterstützung meiner wissenschaftlichen Arbeiten im Rahmen verschiedener Drittmittelprojekte.

Ich danke verschiedenen Institutionen, insbesondere der Universität Hamburg, dem DKRZ und der CSIRO-DAR, für den Zugriff auf ihre Bibliotheken und Rechenanlagen, ohne den diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

ANHANG A: Ableitung einer prognostischen Gleichung für die potentielle Temperatur

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik hat mit Bezug auf eine Masse M die Form (z.B. Dutton, 1976):

$$\frac{de}{dt} = \hat{q} + w_a \quad (\text{A-1})$$

Dabei bezeichnet $e = e(T, V, m_i^k)$ die spezifische innere Energie, q die geänderte Wärmemenge und w_a die geleistete Arbeit. Letztere setzt sich aus der vom Volumen geleisteten Arbeit $-p d(1/\rho) / dt$ und der reibungsbedingten Erwärmung zusammen. Diese kann in atmosphärischen Modellen gegenüber anderen Prozessen vernachlässigt werden. Der Term \hat{q} enthält die Divergenz der Strahlungsflüsse ($-\nabla \mathbf{R}$) und der molekularen Wärmeflüsse. Wird an Stelle der inneren Energie die spezifische Enthalpie $h = e + pV$ verwendet, so lässt sich für den 1. Hauptsatz schreiben (z.B. Keller, 1977):

$$\frac{dh}{dt} = q + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} = \underbrace{\frac{\partial h}{\partial T}}_{c_{pm} = \sum_{k=1}^3 \sum_{i=1}^n c_{pi}^k m_i^k} \cdot \frac{dT}{dt} + \underbrace{\frac{\partial h}{\partial p}}_{\cong 0} \cdot \frac{dp}{dt} + \underbrace{\sum_{k=1}^3 \sum_{i=1}^n \frac{\partial h}{\partial m_i^k}}_{h^k - h^1} \cdot \frac{dm_i^k}{dt} \quad (\text{A-2})$$

Die Gleichung bezieht sich dabei auf n Stoffe der jeweiligen Partialmasse m_i^k , die in den Phasen gasförmig ($k=1$), flüssig ($k=2$) oder fest ($k=3$) vorkommen können*. Aufgrund der Bedingungen in der Atmosphäre kann in Gleichung (A-2) $\partial h / \partial p|_{T, m_i^k}$ als gering abgeschätzt werden (Doms und Herbert, 1985). Die Änderung der Enthalpie aufgrund einer geänderten Zusammensetzung des betrachteten Luftvolumens kann für chemische Reaktionen in atmosphärischen Modellen ebenfalls vernachlässigt werden. Die durch Phasenumwandlungen des Wassers bedingten Änderungen der Enthalpie müssen dagegen berücksichtigt werden. Als prognostische Gleichung für die Temperatur T ergibt sich:

$$c_{pm} \frac{dT}{dt} = \hat{q} - \sum_{k=2}^3 l_{k1} \frac{dq_1^k}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} = q + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} \quad (\text{A-3})$$

* m_i^k bezeichnet den Massenanteil des Stoffes i in der Phase k an der Gesamtmasse der Luft ($\sum m_i^k = 1$).

Dabei bezeichnet q_1^k die Partialmassen des Wassers, l_{21} die Verdampfungswärme und l_{31} die Sublimationswärme. Für ein adiabatisches System ($q = 0$) läßt sich aus Gleichung (A-3) eine Definitionsgleichung für die potentielle Temperatur einer Mischung ableiten:

$$\frac{c_{pm}}{T} dT = \frac{R_m}{p} dp \Rightarrow \theta_m = T \left(\frac{p_\infty}{p} \right)^{R_m/c_{pm}} \quad (\text{A-4})$$

θ_m ist bei adiabatischen Zustandsänderungen eine Erhaltungsgröße. Bei der Ableitung von Gleichung (A-4) wird die Zustandsgleichung für ein Gemisch idealer Gase verwendet (z.B. Haltiner und Martin, 1957):

$$p = \rho R_m T \quad \text{mit} \quad R_m = \sum_{i=1}^n m_i^1 R_i \quad (\text{A-5})$$

Einsetzen von Gleichung (A-4) in Gleichung (A-3) ergibt als prognostische Gleichung für die potentielle Temperatur:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \theta = \frac{\theta}{T} \frac{1}{c_p} q \quad (\text{A-6})$$

Zur Modellierung atmosphärischer Phänomene wird Gleichung (A-4) unter Vernachlässigung der Feuchteinflüsse als Definitionsgleichung der potentiellen Temperatur θ verwendet:

$$\frac{c_p}{T} dT = \frac{R}{p} dp \Rightarrow \theta = T \left(\frac{p_\infty}{p} \right)^{R/c_p} \quad (\text{A-7})$$

Wird die Feuchte berücksichtigt, so wird die Mischung von Wasserdampf und trockener Luft meist zur virtuellen Temperatur T_v zusammengefaßt:

$$T_v = T \left(1 + (R_1^1/R - 1) \cdot q_1^1 \right) \quad (\text{A-8})$$

Die zugehörige potentielle virtuelle Temperatur ist definiert als:

$$\theta_v \equiv T \left(\frac{p_\infty}{p} \right)^{R/c_p} \quad (\text{A-9})$$

ANHANG B: Ableitung einer elliptischen Differentialgleichung für den Druck

Aus der anelastischen Approximation (2-24) und den gemittelten Bewegungsgleichungen (2-10) läßt sich auf verschiedene Weise eine elliptische Differentialgleichung ableiten, aus der der nicht-hydrostatische Druckanteil \tilde{p}_{nh} berechnet werden kann. Nachfolgend wird eine mögliche Vorgehensweise beschrieben.

Die Bewegungsgleichungen (2-10) lassen sich ohne die Druckgradientkraft aufgrund des nicht-hydrostatischen Druckanteils \tilde{p}_{nh} zu jedem Zeitpunkt t vollständig zeitlich explizit integrieren, so daß Zwischenwerte \hat{u}_i für die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors berechnet werden können. Die Werte zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ lassen sich unter Einbeziehung der Druckgradientkraft aufgrund von \tilde{p}_{nh} mit einem zeitlich impliziten numerischen Verfahren berechnen als*:

$$\bar{u}_i^{t+\Delta t} = \hat{u}_i - \frac{1}{\rho_0} \left. \frac{\partial \tilde{p}_{nh}}{\partial x_i} \right|^{t+\Delta t} \Delta t \quad (\text{B-1})$$

Neben der Impulserhaltung muß das Modell auch die Massenerhaltung zu jedem Zeitpunkt gewährleisten. Aus der anelastischen Approximation (2-24), die für die Geschwindigkeit $\bar{u}_i^{t+\Delta t}$ erfüllt sein muß, läßt sich unter Einsetzen von Gleichung (B-1) eine diagnostische Gleichung für den Druckanteil \tilde{p}_{nh} ableiten (vgl. Schlünzen, 1988). Diese erhält dann folgende Form:

$$\nabla^2 \tilde{p}_{nh} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \rho_0 \hat{\mathbf{v}} \quad (\text{B-2})$$

Damit läßt sich der nichthydrostatische Druckanteil \tilde{p}_{nh} implizit aus der anelastischen Approximation auf Basis der Zwischenwerte \hat{u}_i berechnen.

* Die Gleichung bezieht sich auf kartesische Koordinaten.

ANHANG C: Ableitung des Gültigkeitsbereiches der hydrostatischen Approximation

Die dritte Bewegungsgleichung lautet ungemittelt in kartesischen Koordinaten:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + f'u - g \quad (\text{C-1})$$

Wird die Gleichung entsprechend Abschnitt 2.2 über ein Zeit- und Raumintervall $\Delta t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ integriert und eine weitere Zerlegung in einen Grundzustand ρ_0, θ_0, p_0 und mesoskalige Abweichungen $\tilde{\rho}, \tilde{\theta}, \tilde{p}$ vorgenommen, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Boussinesq-Approximation und bei Vernachlässigung der Gradienten der Flüsse aufgrund der Fluktuationen:

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial z} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} + f'\bar{u} - \frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} g - g \quad (\text{C-2})$$

Für den Grundzustand wird vorausgesetzt, daß die hydrostatische Approximation gültig ist, d.h.

$$\frac{\partial p_0}{\partial z} = -g\rho_0 \quad (\text{C-3})$$

Die folgende Skalenanalyse für Gleichung (C-2), durchgeführt für eine isotherme Atmosphäre mit Skalenhöhe H_p , zeigt die Gültigkeit von Gleichung (C-3). Für die Druckgradientkraft

$$\left| \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial z} \right| = \left| R \frac{\partial T_0}{\partial z} + \frac{RT_0}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial z} \right| \sim \frac{RT_0}{H_p} \quad (\text{C-4})$$

folgt mit typischen großskaligen Werten ($T = 273\text{K}$, $R = 287\text{ J/kgK}$ und $H_p = 8\text{ km}$):

$$\left| \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial z} \right| / |g| \sim \frac{RT_0}{H_p g} \rightarrow 1 \quad (\text{C-5})$$

Damit ist Gleichung (C-3) für den großskaligen Grundzustand erfüllt.

Der Druckanteil \tilde{p} enthält die mesoskalige Abweichung des Gesamtdrucks vom Druck im Grundzustand. Wird die mesoskalige Druckabweichung \tilde{p} in einen hydrostatischen Anteil \tilde{p}_{hy} und einen nichthydrostatisch bestimmten Anteil \tilde{p}_{nh} zerlegt, so lässt sich Gleichung (C-2) unter Beachtung des hydrostatischen Grundzustandes (Gleichung C-3) schreiben als:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{hy}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{p}_{nh}}{\partial z} = \underbrace{-\rho_0 \frac{\tilde{p}}{\rho_0} g}_{\text{hydrostatischer Anteil}} - \underbrace{\rho_0 \frac{d\bar{w}}{dt} - \rho_0 f' \bar{u}}_{\text{nicht-hydrostatischer Anteil}} \quad (\text{C-6})$$

Die relative Bedeutung der beiden mesoskaligen Druckanteile lässt sich ebenfalls mit Hilfe einer Skalenanalyse ableiten*:

$$\left| \frac{\partial \tilde{p}_{nh}}{\partial z} \right| \left/ \left| \frac{\partial \tilde{p}_{hy}}{\partial z} \right| \right. = \left| \frac{d\bar{w}}{dt} - f' \bar{u} \right| \left/ \left| \frac{\tilde{p}}{\rho_0} g \right| \right. \sim \frac{W^2/L_z - f'U}{g\Delta\rho/\rho} = \frac{W^2/L_z - f'U}{g\Delta\theta/\theta} \quad (\text{C-7})$$

Mit festen Werten für die charakteristischen Größen $U, W, L_z, \Delta\theta, \theta, g = 10 \text{ m}^2/\text{s}, f' = 8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ergeben sich die in Tabelle C-1 angegebenen Werte.

Phänomen	Charakteristische Größen					Resultierende Werte			
	U[m/s]	W[m/s]	L_z [m]	$\Delta\theta$	θ	W^2/L_z	$f'U$	$g\Delta\theta/\theta$	$\frac{\partial \tilde{p}_{nh}}{\partial z} / \frac{\partial \tilde{p}_{hy}}{\partial z}$
Hochdruckgebiet (Mesoskala- α)	10	10^{-2}	$6 \cdot 10^3$	10	273	$1.7 \cdot 10^{-8}$	$8 \cdot 10^{-4}$	2.8	$2.5 \cdot 10^{-4}$
Land-Seewind-Zirkulation (Mesoskala- β)	10	0.5	10^3	10	273	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-4}$	2.8	$2 \cdot 10^{-4}$
Bergüberströmung bei stabiler Schichtung (Mesoskala- β)	10	1.0	$5 \cdot 10^3$	0	290	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-4}$	0	¥
Konvektionswolke (Mesoskala- γ)	10	5	10^3	5	273	$2.5 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-1}$

Tabelle C-1 Verhältnis von nichthydrostatischer und hydrostatischer Druckgradientkraft am Beispiel verschiedener mesoskaliger Phänomene.

* Aus der linearisierten Gasgleichung unter Berücksichtigung der Definitionsgleichung für die potentielle Temperatur ergibt sich entsprechend Gleichung (2-23): $\Delta\rho/\rho \cong -\Delta\theta/\theta$.

Aus Tabelle C-1 wird anhand der beispielhaft vorgegebenen Werte deutlich, daß die hydrostatische Approximation für die Simulation von Phänomenen der Mesoskala- α und Mesoskala- β meist gültig ist. Lediglich bei rein dynamisch bedingten Prozessen (Bergüberströmung) läßt sich dieses nicht folgern. Die Ergebnisse der Skalenanalyse stimmen gut mit anderen Untersuchungen überein (Orlanski, 1981; Wippermann, 1981; Martin und Pielke, 1983; Schlünzen und Schatzmann, 1984). Wippermann (1981) und Bernhard (1991) weisen darauf hin, daß die Gültigkeit der hydrostatischen Approximation auch von der Stabilität der atmosphärischen Schichtung abhängt. Ein dieses zeigender Zusammenhang mit der densimetrischen Froudezahl Fr_d läßt sich aus Gleichung (C-7) herleiten, wenn die Corioliskraft vernachlässigt wird und die charakteristische Wellenlänge der Vertikalbewegung L_{zb} z.B. für eine Bergüberströmung nach Gleichung (3-6) berechnet wird. Dann ergibt sich:

$$\left| \frac{\partial \tilde{p}_{nh}}{\partial z} \right| \left/ \left| \frac{\partial \tilde{p}_{hy}}{\partial z} \right| \right. \sim \frac{W^2 \rho}{g L_z \Delta \rho} = Fr_d^2 \quad (C-8)$$

Dieser Zusammenhang mit der densimetrischen Froudezahl Fr_d macht deutlich, daß der Einfluß der nichthydrostatischen Druckgradientkraft auf atmosphärische Prozesse mit zunehmender densimetrischer Froudezahl, also geringerer Stabilität der Atmosphäre, wächst.

ANHANG D: Physikalisch, numerisch und durch Filter bedingte Horizontaldiffusion

Der Diffusionskoeffizient, der die physikalisch bedingt Horizontaldiffusion charakterisiert, kann in einem numerischen Modell z.B. nach Gleichung (2-73) berechnet werden. Der numerisch bedingte Diffusionskoeffizient hängt vom verwendeten Differenzenverfahren ab. Beispielsweise entsteht bei Nutzung zentrierter Differenzen für die Advektion keine numerisch bedingte Diffusion. Bei Gegenstromdifferenzen ist die numerisch bedingte Diffusion dagegen erheblich. Der für das Verfahren charakteristische Diffusionskoeffizient läßt sich z.B. in x-Richtung berechnen als (Roache, 1982, Seite 65):

$$K_{\text{Numerik (upstream)}} = \frac{1}{2} \cdot u \Delta x (1 - Co) \quad (D-9)$$

Der Diffusionskoeffizient $K_{\text{numerik (upstream)}}$ nimmt also mit abnehmender Courantzahl $Co = u\Delta t/\Delta x$ zu. Je eher der Integrationszeitschritt die Bedingung $Co = 1$ erfüllt, desto geringer ist die numerisch bedingte Diffusion. Bei fester Courantzahl nimmt $K_{\text{Numerik (upstream)}}$ mit zunehmender Gitterweite ebenfalls zu, wodurch indirekt die zusätzliche Durchmischung durch subskalige Prozesse berücksichtigt wird. Allerdings ist die Diffusivität der upstream-Methode so groß, daß sie meist die durch physikalische Prozesse bedingte Diffusion übertrifft (siehe Tabelle D-1).

Auch die in den Modellen verwendeten Filter wirken als Diffusionsterm im Differentialgleichungssystem. Für ein einfaches Drei-Punkt-Filter, der gegenüber Filtern, die mehr Gitterpunkte berücksichtigen, eine recht hohe numerische Diffusion aufweist, läßt sich der horizontale Diffusionskoeffizient des Filters ableiten als:

$$K_{3\text{-Punkt-Filter}} = \frac{0.25\Delta x^2}{\Delta t} \quad (D-10)$$

In Tabelle D-1 sind beispielhaft die Quotienten von numerisch bzw. durch den Filter bedingter Diffusionskoeffizienten den physikalisch begründbaren Diffusionskoeffizienten gegenübergestellt. Die Zusammenstellung enthält Werte sowohl für höhere (10m/s) als auch für geringere (1m/s) Windgeschwindigkeiten. Da die Quotienten vom Wert der Courantzahl $Co=u\Delta t/\Delta x$ abhängen, werden auch für diese zwei verschiedene Werte betrachtet.

Windgeschwindigkeit	Charakteristische Größen		Resultierende Quotienten	
	Co	Δz [m]	$\frac{K_{\text{Numerik (upstream)}}}{K_{\text{mh}}}$ $= \frac{U\Delta z(1 - Co)}{\sqrt{2}K_{\text{mv}}} \left[\frac{\text{m}}{K_{\text{mv}}} \right]$	$\frac{K_{\text{3-Punkt-Filter}}}{K_{\text{mh}}}$ $= \frac{U\Delta z}{\sqrt{2}K_{\text{mv}}Co} \left[\frac{\text{m}}{K_{\text{mv}}} \right]$
hoch (10m/s)	hoch (0.8)	10	14/ K_{mv}	44/ K_{mv}
		20	28/ K_{mv}	88/ K_{mv}
		100	141/ K_{mv}	442/ K_{mv}
		500	707/ K_{mv}	2210/ K_{mv}
		1000	1414/ K_{mv}	3319/ K_{mv}
		2000	2828/ K_{mv}	8839/ K_{mv}
	gering (0.2)	10	57/ K_{mv}	177/ K_{mv}
		20	113/ K_{mv}	354/ K_{mv}
		100	566/ K_{mv}	1768/ K_{mv}
		500	2828/ K_{mv}	8839/ K_{mv}
		1000	5657/ K_{mv}	17678/ K_{mv}
		2000	11314/ K_{mv}	35355/ K_{mv}
gering (1m/s)	hoch (0.8)	10	1/ K_{mv}	4/ K_{mv}
		20	3/ K_{mv}	9/ K_{mv}
		100	14/ K_{mv}	44/ K_{mv}
		500	71/ K_{mv}	221/ K_{mv}
		1000	141/ K_{mv}	442/ K_{mv}
		2000	283/ K_{mv}	884/ K_{mv}
	gering (0.2)	10	6/ K_{mv}	18/ K_{mv}
		20	11/ K_{mv}	35/ K_{mv}
		100	57/ K_{mv}	177/ K_{mv}
		500	283/ K_{mv}	884/ K_{mv}
		1000	566/ K_{mv}	1768/ K_{mv}
		2000	1131/ K_{mv}	3536/ K_{mv}

Tabelle D-1 Verhältnis der numerisch und durch einen Drei-Punkt-Filter bedingten horizontalen Diffusionskoeffizienten zum physikalisch bedingten Diffusionskoeffizienten.

Die Tabelle zeigt, daß für geringe vertikale Gitterweiten die numerisch bedingte Diffusion geringer als die physikalisch bedingte sein kann. Dieses gilt auch noch für Vertikalgitterweiten um 100m, falls K_{mv} groß ist. Diese Situation ist beispielsweise bei stark instabiler Schichtung gegeben.

Weicht die Courantzahl Co stärker von 1 ab ($Co=0.2$), so übertrifft die numerisch bedingte horizontale Diffusion fast immer die physikalisch bedingte. Bei geringen Windgeschwindigkeiten können die advektiven Prozesse von untergeordneter Bedeutung sind. Dann muß die physikalisch bedingte Diffusion im Modell vor allem im Bereich guter Vertikalauflösung berücksichtigt werden. Bei vertikalen Gitterweiten um 500m und darüber ist die physikalisch bedingte Diffusion deutlich geringer als die numerisch oder durch das Filtern bedingte. Sie kann daher im Modell vernachlässigt werden, falls Lösungen gefiltert werden oder ein diffusives numerisches Verfahren genutzt wird.

Die hier abgeleiteten Zusammenhänge müssen für andere Formulierungen des horizontalen Diffusionskoeffizienten neu abgeleitet werden. Auch eine andere Diffusivität des genutzten numerischen Verfahrens oder selektivere Filter erfordern eine erneute Abschätzung der Quotienten $K_{\text{Numerik}}/K_{\text{mh}}$ und $K_{\text{Filter}}/K_{\text{mh}}$. Sie ist hier nur beispielhaft für ein sehr diffusives numerisches Verfahren und ein sehr diffusives Filter durchgeführt worden. Die tatsächlich in den meisten Modellen vorhandene numerische oder durch das Filtern bedingte Diffusivität liegt unterhalb der hier abgeleiteten Werte.

ANHANG E: Abhängigkeit der entstehenden atmosphärischen Phänomene von den Anfangswerten

Die erste Bewegungsgleichung lautet ungemittelt in kartesischen Koordinaten:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - f_v - f'_w \quad (\text{E-1})$$

Wird der Druck mit Hilfe der Gasgleichung (A-5) ersetzt und Gleichung (E-1) entsprechend Abschnitt 2.2 über ein Zeit- und Raumintervall $\Delta t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ integriert sowie eine weitere Zerlegung in einen Grundzustand ρ_0 , T_0 , p_0 und eine mesoskalige Abweichung $\tilde{\rho}$, \tilde{T} , \tilde{p} vorgenommen, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Boussinesq-Approximation, bei Vernachlässigung der Gradienten der Flüsse aufgrund der Fluktuationen, für vernachlässigbare großskalige Gradienten ($\partial \rho_0 / \partial x = \partial T_0 / \partial x = \partial p_0 / \partial x \cong 0$), bei in lateraler (y-) Richtung homogenen sowie bei stationären Verhältnissen:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = -R \rho_0 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} - f_v - f'_w \quad (\text{E-2})$$

Gleichung (E-2) beschreibt das typische Kräftegleichgewicht für ein stationäres mesoskaliges Phänomen. Anhand einer Größenordnungsabschätzung der Terme kann nun der Einfluß der Anfangswerte auf die Modellergebnisse abgeschätzt werden. Mit Bezug auf die Druckgradientkraft läßt sich ableiten, ob die entstehenden Phänomene eher thermisch oder dynamisch geprägt sind. Die relative Bedeutung der einzelnen Terme im Verhältnis zur Druckgradientkraft ergibt sich mit $\rho_0 \cong 1$ ableiten zu (vgl. Pielke, 1984; Physick, 1988):

$$\left| \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right| \left/ \left| R \rho_0 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right| \right. \sim \frac{(U + \Delta U)^2}{R(\delta T + \Delta T)} = I_h$$

$$\left| \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right| \left/ \left| R \rho_0 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right| \right. \sim \frac{(U + \Delta U)(W + \Delta W)L_x}{L_z R(\delta T + \Delta T)} = I_v$$

$$|f_v| \left/ \left| R \rho_0 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right| \sim \frac{f(U + \Delta U) L_x}{R(\delta T + \Delta T)} \right.$$

$$|f'_w| \left/ \left| R \rho_0 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right| \sim \frac{f'(W + \Delta W) L_x}{R(\delta T + \Delta T)} \right.$$

Mit festen Werten für die charakteristischen Größen U , W , L_x , L_z , δT , $f=10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $f'=8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $R=287 \text{ J/kg K}$ ergeben sich bei fehlerfreien Anfangswerten ($\Delta U=\Delta W=\Delta T=0$) die in Tabelle E-1 angegebenen Werte für die Quotienten der Terme in der horizontalen Bewegungsgleichung.

Phänomen	Charakteristische Größen					Resultierende Werte			
	$U[\text{m/s}]$	$W[\text{m/s}]$	$L_x[\text{m}]$	$L_z[\text{m}]$	δT	l_h	l_v	$\frac{fUL_x}{R\delta T}$	$\frac{f'WL_x}{R\delta T}$
Hochdruckgebiet (Mesoskala- α)	10	10^{-2}	$2 \cdot 10^6$	$6 \cdot 10^3$	10	$3.5 \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$6.6 \cdot 10^{-1}$	$0.5 \cdot 10^{-3}$
Land-Seewind-Zirkulation (Mesoskala- β)	10	0.5	10^5	10^3	10	$3.5 \cdot 10^{-2}$	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$0.1 \cdot 10^{-2}$
Bergüberströmung bei stabiler Schichtung (Mesoskala- β)	10	0.5	$3 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^2$	0	¥	¥	¥	¥
Konvektionswolke (Mesoskala- γ)	10	5	10^4	10^3	5	$6.9 \cdot 10^{-2}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$0.7 \cdot 10^{-2}$	$0.3 \cdot 10^{-2}$

Tabelle E-1 Verhältnis der einzelnen Terme in der Bewegungsgleichung zur horizontalen Druckgradientkraft.

Die resultierenden Werte in Tabelle E-1 zeigen, daß im allgemeinen ein Phänomen durch die aus thermischen Gegensätzen entstehenden Druckgradienten geprägt wird. Dabei kann die vertikale Advektion die horizontale Advektion übertreffen. Bei den ausgewählten Beispielen sind lediglich im Fall einer Bergüberströmung, die verschwindende horizontale Temperaturgradienten ausweist, thermische Einflüsse nicht vorhanden und das Phänomen wird dynamisch geprägt.

ANHANG F: Physikalische Modelle und charakteristische Kennzahlen

In physikalischen Modellen werden die Modellgleichungen nicht mathematisch gelöst, sondern die realen Bedingungen werden unter Berücksichtigung der physikalischen Erhaltungsprinzipien vereinfacht und maßstabsgetreu nachgebildet. Dazu werden die für den zu modellierenden Prozeß relevanten charakteristischen Größen festgelegt und die grundlegenden physikalischen Erhaltungsgleichungen (Abschnitt 2.1) so umgeformt, daß sie dimensionslose Kennzahlen enthalten. Die Werte der Kennzahlen müssen im physikalischen Modell (Wassertank oder Windkanal) und in der Natur gleich sein, oder zumindest zu gleichem Strömungsverhalten führen, um eine Übertragbarkeit der Modellergebnisse auf reale Gegebenheiten zu gewährleisten. In Tabelle F-1 sind Kennzahlen zusammengefaßt, die in physikalischen und mathematischen Modellen der Atmosphäre häufig verwendet werden.

Dimensionslose Kennzahl	Berechnung	Quotient von	kritischer Wert
Densimetrische Froudezahl	$Fr_d = \frac{U}{NL_x}$	Trägheitskraft, Auftriebskraft	1.7
Bulk-Richardson-Zahl	$Ri_B = \frac{N^2 L_z^2}{U^2}$	Auftriebskraft, Trägheitskraft*	0.25
Reynoldszahl	$Re = \frac{L_x U}{\nu}$	Trägheitskraft, Reibungskraft	1.0
Rosbyzahl†	$Ro = \frac{U}{ f L_x}$	Trägheitskraft, Corioliskraft	1.0

Tabelle F-1 Dimensionslose Kennzahlen mit ihrer Definition und kritischen Werten‡.

Für die Froudezahl Fr_d ergibt sich nach Einsetzen der Brunt-Väisälä-Frequenz:

* Die Definition der Richardson'schen Zahl wird als Quotient der Auftriebs- und Scherproduktion aus der Gleichung für die turbulente kinetische Energie abgeleitet.

† Für Werte der Rosbyzahl sehr viel größer 1 kann die Corioliskraft vernachlässigt werden (Pielke, 1984). Ist Ro viel kleiner als 1, so ist die geostrophische Näherung erfüllt (vgl. Abschnitt 2.3.1).

‡ Zur Bedeutung der Symbole siehe SYMBOLVERZEICHNIS.

$$Fr_d^2 = \frac{U^2 \rho}{g L_z \Delta \rho}$$

Oberhalb einer Froudezahl $Fr_d = 1.7$ sind nach Hosker (1984) die Strömungsmuster bei Überströmung eines Gaußberges ähnlich und unterscheiden sich nicht mehr von dem bei neutraler Schichtung entstehenden Strömungsfeld.

Die densimetrische Froudezahl Fr_d ist gleich dem Kehrwert der Wurzel aus der Bulk-Richardson-Zahl. Für Werte der Bulk-Richardson-Zahl größer als 0.25 (stabil geschichtete Atmosphäre) wird die Turbulenz so effektiv unterdrückt, daß die Strömung laminar wird (Businger, 1973; Dutton, 1976). Dieses entspricht einer densimetrischen Froudezahl von 2 und damit etwa der von Hosker (1984) gefundenen Grenze für die Bergüberströmung. Für Werte $-1 \leq Ri < 0$ ist die Scherung des Windprofils Hauptursache für die turbulenten Wirbel, es entsteht die sogenannte "forced convection". Für kleinere Werte der Richardson'schen Zahl ist die Auftriebsproduktion bedeutender und freie Konvektion entsteht.

Die kritische Reynoldszahl Re_{krit} , oberhalb der Strömungen turbulent sind, hängt von der Art der Strömung ab. Für eine typische atmosphärische Strömung liegt Re_{krit} zwischen 1000 und 2000 (Tritton, 1977). Atmosphärische Reynoldszahlen sind fast immer deutlich oberhalb von Re_{krit} und somit turbulent.

Über die Werte der dimensionslosen Kennzahlen kann in physikalischen Modellen die Naturähnlichkeit geprüft werden. Dabei zeigt sich, daß diese Modelle meistens besonders gut für Phänomene der Mesoskala- γ und der Mikroskala geeignet sind. In mathematischen Modellen lassen sich die Kennzahlen zu einer Klassierung der Vielzahl der atmosphärischen Phänomene nutzen (Adrian, 1994; Adrian, 1995) oder zur Reduktion der notwendigen Zahl von Modellrechnungen heranziehen (Niemeier und Schlünzen, 1993).

ANHANG G: Vergleichszahlen

Zum Vergleich zwischen Messungen und Modellergebnissen oder von Modellergebnissen untereinander können verschiedene Maßzahlen herangezogen werden (siehe z.B. Brier und Allen, 1951; Panofsky und Brier, 1958; Taubenheim, 1969; Oeckel, 1979). Ein Hauptproblem besteht darin, daß bei den meisten Vergleichen Signifikanzuntersuchungen aufgrund des geringen Stichprobenumfangs nicht möglich sind. Aus diesem Grund lassen sich aus den in Kapitel 3 vorgeschlagenen Modellanwendungen auch keine statistisch absicherbaren, allgemeingültigen Aussagen ableiten. Die Ergebnisse können jeweils nur als Fallstudie angesehen werden. Die allgemeine Gültigkeit des Modells wird indirekt aus der - nicht statistisch absicherbaren - richtigen Wiedergabe plausibler Modellergebnisse, analytischer Lösungen, anderer Modellergebnisse und von Messungen abgeleitet.

In den Kapiteln 3 bis 5 werden als Fehlermaße die maximale Abweichung D_{\max} , die mittlere Abweichung \bar{D} , die Wurzel aus dem mittleren quadratischen Fehler (RMSE), die Standardabweichung S_p sowie der Korrelationskoeffizient R_{OP} verwendet. Die Fehlermaße werden dabei jeweils für den Vergleich einer Stichprobe von z.B. Modellergebnissen (P_i) und Messungen (O_i) angewendet. Die maximale Abweichung D_{\max} zwischen n Messungen und Modellergebnissen entspricht der maximalen Differenz D_i zwischen beiden:

$$D_{\max} = \max(|D_i| = |O_i - P_i|, i = 1, n) \quad (\text{G-1})$$

Der Mittelwert $\bar{\Psi}$ der Messungen bzw. Modellergebnisse ist definiert als (z.B. Kreyzig, 1975):

$$\bar{\Psi} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Psi_i \quad (\text{G-2})$$

Die mittlere Abweichung \bar{D} ist definiert als:

$$\bar{D} = \bar{O} - \bar{P} \quad (\text{G-3})$$

Damit ergibt sich eine positive mittlere Abweichung, wenn die Meßwerte höher liegen als die Modellergebnisse, und ein negatives \bar{D} im umgekehrten Fall. Die Wurzel aus dem mittleren

quadratischen Fehler RMSE ist ein gutes Maß, wenn bei der Fehlerbetrachtung große Abweichungen bedeutsamer als geringe sind. Diese Vergleichszahl ist definiert als:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2} \quad (\text{G-4})$$

Die Standardabweichung S_p wird vor allem verwendet, um eine kontinuierliche Kontrolle der Modellergebnisse zu gewährleisten (Kapitel 4). Sie wird wie folgt berechnet:

$$S_p = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P})^2} \quad (\text{G-5})$$

Der Korrelationskoeffizient R_{OP} kann in den meisten Fällen aufgrund geringen Datenumfangs nicht statistisch abgesichert berechnet werden. Er lässt sich aber für einen Vergleich von Modellergebnissen mit Messungen (z.B. Flugzeugmessungen) oder von Modellergebnissen untereinander nutzen, wobei die strukturellen Unterschiede erfasst werden. Der Korrelationskoeffizient lässt sich berechnen als (z.B. Kreyzig, 1975):

$$R_{OP} = \frac{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2\right) \left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P})^2\right)}} \quad (\text{G-6})$$

ANHANG H: Tabellarische Darstellung der Prüfpunkte des Validierungskriteriums “Vollständigkeit“ für eine analytische Lösung und verschiedene nichthydrostatische mesoskalige Modelle

In den Tabellen H-2 bis H-4 sind die Eigenschaften der analytischen Lösung für eine Bergüberströmung (Abschnitt 3.3.1) und einiger hochauflösender Regionalmodelle (EURAD-MM5, EZM, FITNAH, GESIMA, KAMM, MESOSCOP, METRAS) zusammengefaßt. Die Angaben beruhen auf einer Zusammenstellung von Schlünzen (1994a) und zusätzlichen Informationen zu EURAD-MM5 (Memmesheimer, 1994, persönliche Mitteilung). Zur Klärung einzelner Modelleigenschaften sind außerdem die in Tabelle H-1 aufgeführten Veröffentlichungen herangezogen worden. Sind die Modelle bei anderen Modellanwendungen anders genutzt worden, oder haben seit April 1994* veränderte Eigenschaften erhalten, so sind diese Änderungen in den Tabellen nicht enthalten.

* April 1994 ist der Zeitpunkt der Modellerhebung, auf der die Arbeit von Schlünzen (1994a) beruht.

Modellname	Literaturhinweise
EURAD-MM5	Hass (1991); et al. (1993); (1993) Grell Hass et al.
EZM (EUMAC Zooming Model)	Moussiopoulos (1989); (1990); Flassak Moussiopoulos (1994)
FITNAH (Flow over Irregular Terrain with Natural and Anthropogenic Heat Sources)	Groß (1987); (1989); Groß (1991) Groß
GESIMA (Geostrophischer Simulationsmodell der Atmosphäre)	Mengelkamp (1991); Kapitza und Eppel (1992); Eppel et al. (1995)
KAMM (Karlsruher Atmosphärisches Mesoskaliges Modell)	Adrian und Fiedler (1991); (1994); Adrian (1994) Emeis
MESOSCOP (Mesoskaliges Modell Oberpfaffenhofen)	Schumann et al. (1987); (1990); Schumann (1992) Alheit und Hauf
METRAS (Mesoskaliges Transport- und Strömungsmodell)	Schlünzen (1990); und Schlünzen (1993); Niemeier Schlünzen (1995) Lüpkes und

Tabelle H-1 Berücksichtigte Modelle und Literaturhinweise.

	ANALY. LÖSG.*	EURAD- MM5	EZM	FITNAH	GESIMA	KAMM	MESO- SCOP	METRAS
Wind prognostisch (Gl. 2-10)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja
Temperatur prognostisch (Gl. 2-13)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja
Feuchte prognostisch (Gl. 2-12)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja
Flüssigwasser prognostisch (Gl. 2-12)	nein	ja	nein	ja	ja	nein	ja	ja
Eis prognostisch (Gl. 2-12)	nein	ja	nein	nein	ja	nein	ja	nein
Schadstoffkonzentration prognostisch (Gl. 2-12)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja
Temperaturvariable konsistent formuliert (Abschnitt 2.1)	ja	ja	ja/nein†	ja/nein†	ja/nein†	ja/nein†	ja	ja
Kontinuitätsgleichung								
- vollständig (Gl. 2-11)	nein	ja	nein	nein	nein	nein	nein	nein
- anelastische Approximation (Gl. 2-24)	nein	nein	ja	ja	ja	nein	ja	ja
- divergenzfreies Windfeld (Gl. 2-25)	ja	nein	nein	nein	nein	ja	nein	nein
Boussinesq-Approximation								
- $\tilde{\rho}(\tilde{\theta}, \tilde{q}_1, \tilde{p})$ (Gl. 2-22)	nein	ja	nein	nein	nein	ja/nein‡	ja	ja
- $\tilde{\rho}(\tilde{\theta})$ (Gl. 2-23)	nein	nein	ja	ja	ja	ja	nein	nein
Corioliskraft (Abschnitt 2.3.18, Punkt 8)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja

Tabelle H-2 In den berücksichtigten Modellen verwendete Gleichungen und Approximationen.

* Analytische Lösung für eine Bergüberströmung, entsprechend Abschnitt 3.3.1.

† Anhand der ausgewerteten Veröffentlichungen nicht sicher entscheidbar.

‡ Durch verwenden der Exnerfunktion Π ist der Druck enthalten, Einfluß von Wasserdampf, Flüssigwasser und Eis werden nicht berücksichtigt.

	ANALY. LÖSG. *	EURAD- MM5	EZM	FITNAH	GESIMA	KAMM	MESO- SCOP	METRAS
stetiger Übergang der Flüsse zwischen Prandtl-schicht und Grenzschicht bei allen Schichtungen (Abschnitt 2.4.1.3)	entfällt†	ja/nein‡	nein	ja/nein‡	nein	ja/nein‡	ja/nein‡	ja/nein§
Symmetrie des Schubspannungstensors (Abschnitt 2.4.1.1)	entfällt†	nein	ja	ja/nein**	nein	ja	ja	ja
Diffusionskoeffizienten skalarer Größen: (Abschnitt 2.4.1.1; (Gl. 2-35) oder (Gl. 2-37))	entfällt†	ja	ja	ja/nein‡	nein	ja	ja	nein
Turbulenzparametrisierung stabilitätsabhängig (Abschnitt 2.4.1.3)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja
Konvektionsparametrisierung (Abschnitt 2.4.1.4)	nein	ja	nein	nein	nein	ja	nein	ja
Wolkenmikrophysikparametrisierung (Abschnitt 2.4.2)	nein	ja	nein	ja	ja	nein	ja	ja
Strahlungsflüsse in der Atmosphäre (Abschnitt 2.4.3)								
- kurzwellig	nein	nein	ja	ja	nein	nein	nein	ja
- langwellig	nein	ja	ja	ja	ja	ja	nein	ja
Hangneigung und Abschattung durch Berge (Abschnitt 2.4.3)	nein	nein	nein	ja	nein	ja/nein††	nein	ja
Quellarten (Punkt, Linie, Fläche, Volumen; kalt, warm) (Abschnitt 2.4.4)	nein	ja/nein‡‡	ja/nein§§	ja/nein***	ja/nein§§	ja / nein†††	ja/nein§§	ja/nein†††
Deposition: Gase, Partikel								
- trocken (Abs. 2.4.5.1)	nein	ja	ja	nein	ja / nein†††	ja	nein	ja
- naß (Abs. 2.4.5.2)	nein	ja	nein	nein	nein	nein	nein	ja

* Analytische Lösung für eine Bergüberströmung, entsprechend Abschnitt 3.3.1.

† Bei der analytischen Lösung wird Turbulenzfreiheit vorausgesetzt.

‡ Anhand der ausgewerteten Veröffentlichungen nicht sicher entscheidbar, da verschiedene Turbulenzparameterisierungen anwählbar sind bzw. verwendet werden.

§ Nicht für alle Turbulenzparameterisierungen bei allen Schichtungen stetige Flüsse.

** Bei einigen Modellanwendungen wird die Symmetrie des Schubspannungstensors nicht berücksichtigt.

†† Abschattung durch Berge vermutlich nicht berücksichtigt.

‡‡ Nur Punkt- und Volumenquellen.

§§ Nur Volumenquellen.

*** Nur Punktquellen (Lagrange-Modell).

††† Nur Punkt- und Volumenquellen, warme und kalte Quellen.

‡‡‡ Nur für Partikel.

Tabelle H-3 In den berücksichtigten Modellen verwendete Parametrisierungen.

	ANALY. LÖSG.*	EURAD- MM5	EZM	FITNAH	GESIMA	KAMM	MESO- SCOP	METRAS
Bodenenergiebilanz (Abschnitt 2.5.4)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	nein	ja
Bodenfeuchtebilanz (Abschnitt 2.5.4)	nein	ja	ja	ja	ja	ja	nein	ja
Bewuchs, Bebauung (Abschnitt 2.5.4)								
- eine Schicht bzw. z_0	nein	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja
- mehrere Schichten	nein	nein	nein	ja	nein	nein	nein	nein
zeitabhängige großskalige Werte (Nesting) (Abschnitt 2.5.1)	nein	ja	ja	ja/nein†	ja/nein†	ja/nein†	nein	nein‡
Grenzschicht vertikal aufgelöst gerechnet (mindestens 12 Schichten)	ja§	ja/nein**	ja	ja	ja	ja	ja	ja

Tabelle H-4 In den berücksichtigten Modellen verwendete Randbedingungen und sonstige Modelleigenschaften.

Die in den Tabellen H-2 bis H-4 zusammengestellten Modelleigenschaften müssen im Vergleich mit den notwendigen Modelleigenschaften (Tabelle 4-2) betrachtet werden, um den potentiellen Anwendungsbereich der einzelnen Modelle zu ermitteln. Die Eigenschaften sind in Tabelle H-5 summarisch aufgeführt, wobei unterschieden wird zwischen den notwendigen Modelleigenschaften (in den Tabellen 4-2 und 4-3 mit "ja" gekennzeichnet) und den nur für bestimmte meteorologische Situationen erforderlichen Modelleigenschaften (in den Tabellen 4-2 und 4-3 mit "falls nötig" gekennzeichnet). Alle vollständig vorhandenen Modelleigenschaften wurden mit einem Punkt gezählt, nur teilweise vorhandene Modelleigenschaften wurden als in der Hälfte der potentiellen Anwendungsfälle vorhanden (0,5) gezählt. Nicht vorhandene Eigenschaften wurden nicht berücksichtigt.

* Analytische Lösung für eine Bergüberströmung, entsprechend Abschnitt 3.3.1.

† Mit dem Modell wurden bereits Modellrechnungen mit zeitabhängigen großskaligen Werten durchgeführt.

‡ Das Nesting des Modells ist noch in der Testphase.

§ Die analytische Lösung liefert Ergebnisse in beliebig feiner Auflösung.

** Je nach Turbulenzparametrisierung.

ANHANG I: Das mesoskalige Transport- und Strömungsmodell METRAS

Das Mesoskalige Transport- und Strömungsmodell METRAS ist am Meteorologischen Institut der Universität Hamburg speziell für die Modellierung des Transportes und der Ablagerung von Luftverunreinigungen entwickelt worden. Da für realitätsnahe Transportrechnungen möglichst realitätsnahe Wind-, Temperatur- und Feuchtefelder vorgegeben werden müssen, werden im Modell nicht nur die Transportgleichungen selbst, sondern die gesamten physikalischen Grundgleichungen (Abschnitt 2.1) dreidimensional gelöst.

Modellgleichungen und Approximationen

Die Grundlagen des Modells sind von Schlünzen (1988, 1990a), Schlünzen et al. (1994) und in den Berichten zum Projekt "Zirkulation und Schadstoffumsatz in der Nordsee - ZISCH" (Schatzmann, 1987; Schatzmann et al. 1988, 1989, 1990) beschrieben worden und sollen hier nur kurz zusammengefaßt werden. Das Modell beruht auf den Gleichungen (2-1) - (2-4), die in Flußform dreidimensional gelöst werden. Prognostisch werden Wind (Komponenten \bar{u} , \bar{v} , \bar{w}), potentielle Temperatur ($\bar{\theta}$), Feuchte (\bar{q}_1^1), Wolken- und Regenwasser (\bar{q}_1^{2C} und \bar{q}_1^{2R}) und bis zu 89 Konzentrationen (\bar{C}) sowie die Oberflächentemperatur und Oberflächenfeuchte berechnet. Diagnostisch ermittelt werden der nichthydrostatische und der hydrostatische Druckanteil (\tilde{p}_{nh} und \tilde{p}_{hy}), die Temperatur (\bar{T}), der mesoskalige Dichteanteil ($\tilde{\rho}$), die virtuelle potentielle Temperatur ($\bar{\theta}_v$), die Diffusionskoeffizienten (K_{mv} , K_{mh} , $K_{\theta v}$, $K_{\theta h}$), die Schubspannungsgeschwindigkeit (u^*), die Skalengrößen für Temperatur (θ^*) und andere skalare Größen (χ_*), die Monin-Obukhov-Länge L , die Erwärmungs- und Abkühlungsraten in der Atmosphäre aufgrund von kurz- und langwelligen Strahlungsflußdivergenzen (Q_θ), die Inversionshöhe (z_i), die Depositionsgeschwindigkeiten für Stoffe ($v_{D\chi}$) sowie die in einem Zeitintervall abgelagerten Stoffmengen.

Außer den in Abschnitt 2.3.1 aufgeführten, in der Mesoskala allgemein gültigen Näherungen wird zusätzlich nur die anelastische Approximation im Modell verwendet. Zur Berechnung der mesoskaligen Dichteabweichung $\tilde{\rho}$ wird Gleichung (2-22) benutzt, so daß auch konvektive Prozesse mit METRAS simuliert werden können. Die hydrostatische Approximation wird nur für den großskaligen Grundzustand und den thermischen Druckanteil \tilde{p}_{hy} als gültig vorausgesetzt. Für den

Druckanteil \tilde{p}_{nh} wird eine diagnostische Gleichung entsprechend ANHANG B im bodenfolgenden Koordinatensystem gelöst.

Parametrisierte subskalige Prozesse

Die subskaligen turbulenten Flüsse werden über eine Schließung 1. Ordnung parametrisiert. Sie können nach Abschnitt 2.4.1.2 unter Berücksichtigung subskaliger Bewuchseigenschaften mit einer Flußmittelungsmethode berechnet (Herrmann, 1994) oder über eine Parametermittlung festgelegt werden (Schlünzen et al., 1994). Oberhalb der Prandtlschicht werden die turbulenten Flüsse nach Dunst (1982) und Schlünzen (1990) als Funktion der bodennahen Impulsflüsse und der lokalen Stabilität berechnet (Abschnitt 2.4.1.3). Alternativ kann auch ein Mischungswegansatz oder ein "counter-gradient-Ansatz" genutzt werden (Lüpkes und Schlünzen, 1995).

Wolkenmikrophysikalische Prozesse werden über das Kessler-Schema (Abschnitt 2.4.2) berücksichtigt (Köhler, 1990; Bigalke und Schatzmann, 1994; Schlünzen und Krell, 1994; Schlünzen et al., 1994). Dabei werden die Umwandlungsprozesse zwischen Wasserdampf, Wolken- und Regenwasser aufgrund von Kondensation, Verdunstung, Autokonversion und Akkreszenz und die Sedimentation von Regenwasser in parametrisierter Form berücksichtigt. Die Wolken müssen skalig sein, eine subskalige Bedeckung wird im Modell nicht berechnet. Daher sollte die Gitterweite des Modells 5 km nicht überschreiten (vgl. Abbildung 1-1).

Die Divergenzen der Strahlungsflüsse in der Atmosphäre werden sowohl kurz- als auch langwellig über eine Zweistromapproximation nach Bakan (1995) berechnet. Da die strahlungsbedingten Temperaturänderungen bei wolkenlosem Himmel in der Atmosphäre relativ gering sind, wird in diesem Fall die Strahlungsflußdivergenz in der Atmosphäre empirisch berechnet (Abschnitt 2.4.3) und nur die Bodenenergiebilanz unter Berücksichtigung der Strahlungsflußdivergenzen gelöst. Die kurzwellige Einstrahlung wird zeit- und ortsabhängig am Boden unter Berücksichtigung von Boden- neigung und Abschattungseffekten durch Berge berechnet. Die Erwärmungsrate hängt vor allem von der Albedo ab, die in Abhängigkeit von den subskaligen Bodennutzungscharakteristiken festgelegt wird. Die langwellige Ausstrahlung entspricht einer Schwarzkörperstrahlung, die Emissivität wird als unabhängig von der Bodennutzung angenommen. Liegen subskalige Bodennutzungen vor, so werden bei Nutzung des Blendhöhenverfahrens die für die subskaligen Bodennutzungen charakteristischen Temperaturen berücksichtigt.

Die trockene Deposition wird über ein Widerstandsmodell berechnet (vgl. Abschnitt 2.4.5.1) (Pahl, 1990; Pahl und Schlünzen, 1990; Schlünzen und Pahl, 1992; Schlünzen et al., 1994). Die Depositionsgeschwindigkeit hängt von der Jahreszeit, der Bodennutzung, der kurzweiligen Strahlungsbilanz, den atmosphärischen Gegebenheiten und den Eigenschaften des Schadstoffes ab. Neben verschiedenen Gasen (Schwefeldioxid, Stickstoffmonoxid, Stickstoffdioxid, Salpetersäure, Ammoniak, Ozon, Wasserstoffperoxid, Formaldehyd, Aldehyde (summarisch), organische Säuren (summarisch), organische Peroxide (summarisch), Peroxiessigsäure) wird auch die Ablagerung von Nitrat- und Sulfatpartikeln und ausgewählter Schwermetalle (z.B. Blei) modelliert (Schlünzen et al., 1995). Für die nasse Deposition wird ein Bulk-Ansatz verwendet (Abschnitt 2.4.5.2; Bigalke und Schatzmann, 1994; Schlünzen et al., 1994). Die Deposition wird stoffspezifisch, getrennt nach trockener und nasser Deposition als Momentanwert, 10-Minuten-, Stunden- oder Tagesintegral berechnet. Im Transportteil des Modells können bis zu 89 Stoffe, ihre chemischen Umwandlungen sowie ihre Wasserlöslichkeit berücksichtigt werden.

Zur realitätsnahen Berücksichtigung der Schadstoffausbreitung aus Punktquellen ist in das mesoskalige Modell ein hochauflösendes Transportmodell (Gitterpunktmodell) und ein Integralmodell interaktiv genestet, mit dem auch die quellnahe Auftriebsphase simuliert werden kann (Schatzmann und Policastro, 1984). Dadurch wird die Durchmischung in Quellnähe vermindert (vgl. Abschnitt 2.4.4). Im genesteten Transportmodell wird horizontal eine fünffach und vertikal eine dreifach verfeinerte Auflösung verwendet (Bigalke und Schatzmann, 1989; Bigalke, 1991; Bigalke, 1992).

Chemische Umsetzungen können in METRAS gegenwärtig nach zwei verschiedenen Verfahren berücksichtigt werden. Die kompakte EMEP-Chemie (Sandnes und Styve, 1992; Thehos, 1991) enthält vereinfacht Aerosolbildungsprozesse (Niemeier, 1993; Schatzmann et al., 1994a). Die komplexere Gasphasenchemie CHEMSAN (Renner et al. 1993) ist dagegen auch für Ozonbildungsstudien geeignet.

Rand- und Anfangswerte

Die Randwerte werden an den seitlichen Rändern und am oberen Rand des Modells so festgelegt, daß entstehende Wellen das Modellgebiet reflektionsfrei verlassen können oder absorbiert werden. Dazu werden z.B. an den seitlichen Rändern die Normalkomponenten des Windvektors weitestgehend berechnet und für die randnormale Advektion am Ausströmrand ein upstream-Verfahren, am Einströmrand Strahlungsrandbedingungen benutzt (Schlünzen et al., 1994). Für alle

anderen Größen werden wie am oberen Rand die Normalgradienten Null gesetzt. Die Reflexion von Wellen am oberen Rand wird durch absorbierende Schichten verhindert. In diesen erfolgt auch eine Anpassung der im Modell berechneten Windfelder und Zustandsvariablen an großskalige Werte. Die gleiche Anpassung wie am oberen Rand kann auch an den seitlichen Rändern durchgeführt werden, wenn das Modell mit zeitabhängigem großskaligen Antrieb betrieben wird (Nesting). Die Festlegung der absorbierenden Schichten ist dabei in Hinblick auf das Nesting gegenüber früheren Modellversionen geändert, in denen relativ schwache absorbierende Schichten benutzt wurden (Durran, 1981; Schlünzen, 1990). Die Koeffizienten werden jetzt nach Källberg (1977) berechnet als:

$$\alpha = 1 - \tanh\left(\frac{a_{\alpha}}{N-3} \cdot i\right) \quad (I-1)$$

Dabei wird für die hier vorgestellten Modellrechnungen $N = 4$ und $a = 0.4$ gesetzt; i bezeichnet den Index des Gitterpunktes vom Rand (Schatzmann und Schlünzen, 1995).

Am Boden, der unteren Begrenzung des Modellgebietes, wird für den Wind die Haftbedingung angenommen. Temperatur bzw. Feuchte werden aus einer Bilanzgleichung der Energie- bzw. Feuchteflüsse am Boden nach der "force-restore"-Methode berechnet (vgl. Abschnitt 2.5.4). Die Ablagerung von Schadstoffen am Boden bzw. Bewuchs wird über ein Depositionsmodell berücksichtigt (vgl. Abschnitt 2.4.5.1).

Für die Initialisierung des Modells werden großskalige (geostrophische) Werte für den Wind, die Temperatur, Feuchte und den Druck am Boden sowie die Temperatur- und Feuchtegradienten als Funktion der Höhe vorgegeben. Mit diesen Anfangswerten erfolgt die Modellinitialisierung entsprechend Abschnitt 2.6 dynamisch. Mit einer eindimensionalen Version des Modells wird meist für den rauhesten Gitterpunkt im Modellgebiet ein stationäres Profil errechnet. Dieses wird horizontal homogen im mehrdimensionalen Modell vorgegeben, in das die Topographie über die Diastrophie-Methode eingeführt wird. Werden zeitabhängige Randwerte genutzt, so werden die Anfangswerte des Modells über ein einfaches Analyseverfahren auf das Modellgitter interpoliert und ebenfalls eine dynamische Initialisierung durchgeführt.

Lösungsverfahren

Die Modellgleichungen werden in einem bodenfolgenden η -Koordinatensystem gelöst (vgl. Abschnitt 2.7), dessen y-Achse beliebig gegen Nord orientiert sein kann (Niemeier und Schlünzen, 1993). Die Gitterweite lässt sich in horizontaler und vertikaler Richtung nicht-äquidistant festlegen. Beides ermöglicht eine feine horizontale Auflösung in den für die jeweiligen Modellrechnungen interessierenden Gebieten bei einer gröberen Auflösung in weniger relevanten Bereichen des Simulationsgebietes. Die bodenfolgenden Koordinaten erleichtern die Vorgabe der unteren Randbedingungen über topographisch gegliedertem Gelände.

Die Modellgleichungen werden auf einem ARAKAWA-C Gitter numerisch gelöst, wobei die einzelnen Terme der verschiedenen Bilanzgleichungen im Modell mit unterschiedlichen Verfahren diskretisiert werden. Die Advektions- und Horizontaldiffusionsterme in den Erhaltungsgleichungen für Impuls werden zeitlich mit dem Adams-Bashforth-Verfahren und räumlich zentriert berechnet. Die zeitliche Integration der Druckgradientterme und sämtlicher Vertikaldiffusionsterme erfolgt implizit. Bei sehr kleinen Zeitschritten kann aus Rechenzeitgründen die Vertikaldiffusion auch explizit berechnet werden. Die Advektion skalarer Größen wird zeitlich explizit und räumlich mit Gegenstromdifferenzen berechnet. Die verbleibenden Terme werden zeitlich explizit und räumlich zentriert diskretisiert.

Die Amplituden von Wellen hoher Frequenzen, die aufgrund der nichtlinearen Wellenwechselwirkung entstehen, werden in METRAS mit einem 7-Punkt Filter (Shapiro, 1971) reduziert. Die horizontale Diffusion wird bei horizontalen Gitterweiten von mehr als 1 km nicht berücksichtigt, da die durch das Filtern eingeführte horizontale Diffusion in gleicher Größenordnung liegt. Skalare Größen werden ohne Horizontaldiffusion gerechnet und nicht gefiltert, da das upstream-Verfahren bereits ausreichend diffusiv ist.

Modellanwendungen und Validierung

Das Modell ist zur Prüfung der implementierten numerischen Verfahren mit analytischen Lösungen und zur weiteren Validierung mit Messungen und Ergebnissen anderer mesoskaliger Modelle verglichen worden (Schlünzen, 1988; Schlünzen, 1990; Pahl, 1990; Pahl und Schlünzen, 1990; Bigalke, 1991; Bigalke, 1992; Schlünzen, 1992; Neick, 1992; Niemeier, 1992; Niemeier und Schlünzen, 1993; Lüpkes et al., 1994; Schlünzen et al., 1995b). Zudem sind Modellanwendungen entsprechend dem in dieser Arbeit vorgestellten Validierungskonzept durchgeführt worden (vgl.

Abschnitt 5.2.4). Anwendungen des Modells erfolgten auch zur Untersuchung des Tideeinflusses und von Topographie auf die Land-Seewind-Zirkulation und küstennahe Phänomene in gemäßigten und polaren Breiten (Schlünzen, 1988; Schlünzen, 1989a; Schlünzen, 1990; Wu und Schlünzen, 1992; Schlünzen und Krell, 1994; Nitz, 1994; Schatzmann und Schlünzen, 1995; Lüpkes und Schlünzen, 1995) sowie auf den küstennahen Stofftransport (Schlünzen, 1988; Schlünzen, 1989b; Schlünzen et al., 1992; Schlünzen und Pahl, 1992; Schlünzen und Krell, 1994; Schlünzen et al., 1994a; Schlünzen und Niemeier, 1995). Auch Hindernisumströmungen wurden simuliert (Niemeier, 1992; Niemeier und Schlünzen, 1993), die räumliche Repräsentativität von Messungen untersucht (Schatzmann et al., 1993b; Bigalke und Schatzmann, 1994; Niemeier und Schlünzen, 1993), atmosphärische Stoffeinträge in küstennahe Gewässer ermittelt (Schlünzen und Schatzmann, 1989; 1991; Schatzmann et al., 1991; 1992; 1993a,b; 1994a; 1995; Bigalke und Schatzmann, 1994; Niemeier et al., 1994; Schlünzen und Krell, 1994; Schlünzen, 1994b; Schlünzen und Niemeier, 1995; Schlünzen et al., 1995a) sowie der Stofftransport über Land modelliert (Neick, 1992; Schatzmann et al., 1994c). Auch die bei den Modellrechnungen genutzten Parametrisierungen sind untersucht worden (Pahl, 1990; Pahl und Schlünzen, 1990; Köhler, 1990; Wu und Schlünzen, 1992; Herrmann, 1994; Lüpkes und Schlünzen, 1995).

Mit dem Modell sind verschiedene Phänomene der Mesoskala- β und Mesoskala- γ und der Mikroskala- α simuliert worden. Grenzen in der Anwendbarkeit des Modells sind gegenwärtig vor allem durch die genutzten Parametrisierungen gegeben, die nur bis zu einigen Kilometern Gitterweite gültig sind. Bei größeren Gitterweiten müßten z.B. Wolken subskalig modelliert werden. Bei sehr kleinen Gitterweiten (einige zehn Meter) ist die Anwendbarkeit des Modells durch die Turbulenzparametrisierung limitiert, so daß METRAS am besten mit horizontalen Gitterweiten zwischen einigen zehn Metern und einigen Kilometern betrieben wird.

Eine gewisse Beschränkung in den Anwendungsmöglichkeiten bildet der Speicherplatzbedarf des Modells, der für Modellläufe, in denen alle in METRAS implementierten Parametrisierungen (Turbulenz, Wolken, Blendhöhenkonzept) mit Nesting und unter Nutzung der EMEP-Chemie bei etwa 150 dreidimensionalen Feldern liegt. Davon werden allein 25 für die Lösung der elliptischen Differentialgleichung für den Druck benötigt. In dieser komplexen Version kann das Modell für realistische Anwendungen nur auf Großrechnern betrieben werden. Für kleine Modellgebiete bei reduzierter Physik und Chemie ist es dagegen auf einer Workstation lauffähig. Für die Simulation von Land-See-Wind-Zirkulationen ähnlich der in Abschnitt 3.4.1 beschriebenen, mit Nesting, ohne Wolken und ohne chemische Umsetzungen, werden dabei etwa 5 CPU Stunden für 24 Stunden Vorhersage auf einer Digital-alpha Workstation benötigt. Für die in Abschnitt 3.3.1 beschriebenen

Läufe, die aufgrund hoher Windgeschwindigkeiten kleine Zeitschritte erfordern, werden 24 Stunden in 16 CPU Stunden integriert.*

* Die angegebenen Rechenzeiten und Speicherplatzanforderungen wurden bei Modellrechnungen im Oktober 1994 ermittelt.

LISTE DER ABBILDUNGEN

	Seite
Abbildung 1-1 Einteilung atmosphärischer Phänomene nach charakteristischer Zeitdauer T_c und Horizontalausdehnung L_x (nach Orlandi, 1975; Randerson, 1976).	2
Abbildung 1-2 Einteilung atmosphärischer Modelle in Modellgruppen entsprechend ihrer minimalen und maximalen zeitlichen (T_c) und räumlichen (L_x) Auflösung.....	3
Abbildung 3-1 u-Komponente des Windes (links, Isolinienabstand 1 m/s) und Vertikalwind (rechts, Isolinienabstand 0.1 m/s), berechnet nach der analytischen Lösung (Gleichung 3-2 bis 3-5) für stabile Schichtung und einen geostrophischen Wind von 10 m/s an Stützstellen, die den Gitterpunkten der Modellanwendungen in Abschnitt 5.2.4.1 entsprechen.	66
Abbildung 3-2 Störungen im Feld der potentiellen Temperatur bei einem mittleren Wind von $U = 10$ m/s (links) und von $U = 5$ m/s (rechts). Der Isolinienabstand beträgt jeweils 0.5°K , berechnet nach der analytischen Lösung (Gleichungen 3-2 bis 3-5) an Stützstellen, die den Gitterpunkten der Modellanwendungen in Abschnitt 5.2.4.1 entsprechen.	67
Abbildung 5-1 Gegenüberstellung von analytischer Lösung und verschiedenen hochauflösenden Regionalmodellen auf Basis des Validierungskriteriums "Vollständigkeit", Bereich "Dynamik" (11 Modelleigenschaften für die <i>Basisvalidierung</i> erforderlich, für die <i>erweiterte Validierung</i> bis zu einer zusätzlichen Eigenschaft notwendig (insgesamt 12)).	103
Abbildung 5-2 Gegenüberstellung von analytischer Lösung und verschiedenen hochauflösenden Regionalmodellen auf Basis des Validierungskriteriums "Vollständigkeit", Bereich "Thermodynamik" (15 Modelleigenschaften sind für die <i>Basisvalidierung</i> erforderlich, für die <i>erweiterte Validierung</i> sind bis zu 9 zusätzliche Eigenschaften notwendig (insgesamt 24)).	105
Abbildung 5-3 Gegenüberstellung von analytischer Lösung und verschiedenen hochauflösenden Regionalmodellen auf Basis des Validierungskriteriums "Vollständigkeit", Bereich " Stoffdynamik" (17 Modelleigenschaften sind für die <i>Basisvalidierung</i> erforderlich, für die <i>erweiterte Validierung</i> sind bis zu 11 zusätzliche Eigenschaften notwendig (insgesamt 28)).	107
Abbildung 5-4 Mit METRAS modellierte u-Komponente des Windes (links, Isolinienabstand 1 m/s) und Vertikalwind (rechts, Isolinienabstand 0.1 m/s) entsprechend Modellanwendung 3.3.1 bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s nach 9 Stunden Simulationszeit.	114

- Abbildung 5-5 Zeitserien am Kontrollgitterpunkt für die Bergüberströmung bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s. Durchgezogene Linien stellen die Modellergebnisse für die einfache, gestrichelte Linien für die doppelte Horizontalauflösung dar. 118
- Abbildung 5-6 Zeitserien von Gebietsmittelwerten für die Bergüberströmung bei stabiler Schichtung und einem geostrophischen Wind von 10 m/s. Durchgezogene Linien stellen die Modellergebnisse für die einfache, gestrichelte Linien für die doppelte Horizontalauflösung dar. 118

LISTE DER TABELLEN

	Seite
Tabelle 2-1 Werte für die von-Kármán-Konstante κ und die Koeffizienten der Profilkfunktionen. .25	.25
Tabelle 3-1 Eingangswerte für eine Grenzschichtsimulation auf der Nord- und Südhalbkugel.62	.62
Tabelle 3-2 Eingangswerte für eine Bergüberströmung.65	.65
Tabelle 3-3 Eingangswerte für eine Modellsimulation im Vergleich zum Gaußmodell.....70	.70
Tabelle 3-4 Eingangswerte für eine Seewindzirkulation.74	.74
Tabelle 3-5 Typische räumliche und zeitliche Repräsentativität von Flugzeugmessungen und Modellergebnissen.78	.78
Tabelle 3-6 Fehlerbereiche für einen Vergleich von Modellergebnissen und Messungen. Als Basis wird für dieses Beispiel die Genauigkeit meteorologischer Routinemessungen herangezogen.80	.80
Tabelle 3-7 Fehlerbereiche für einen Vergleich von Modellergebnissen mit Flugzeugmessungen (Beispiel: Fallstudie 23. Mai 1989).....83	.83
Tabelle 3-8 Fehlerbereiche für einen Vergleich von Modellergebnissen mit Messungen im Gebiet der Sophienhöhe.....84	.84
Tabelle 4-1 Bereiche, die im Validierungskonzept unterschieden werden. Die <i>Basisvalidierung</i> ist Teil der <i>erweiterten Validierung</i> , die Validierung der "Dynamik" Teil der "Thermodynamik" und diese Teil der "Stoffdynamik"87	.87
Tabelle 4-2 Notwendige Gleichungen und mögliche Approximationen als Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Vollständigkeit".90	.90
Tabelle 4-3 Parametrisierungen, Randbedingungen und sonstige Anforderungen als Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Vollständigkeit".91	.91
Tabelle 4-4 Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Nachvollziehbarkeit".....93	.93
Tabelle 4-5 Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Realisierungsgüte".94	.94
Tabelle 4-6 Anwendungstests als Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Ergebnisgüte". Dunkel unterlegt sind die Anwendungstests, die nur bei einer <i>erweiterten Validierung</i> durchzuführen sind. In den angegebenen Abschnitten sind die Eingangswerte und die zulässigen Fehlerbereiche beschrieben.....95	.95
Tabelle 4-7 Prüfpunkte für das Validierungskriterium "Ergebniskontrolle".97	.97
Tabelle 5-1 <i>Basisvalidierung</i> , Kriterium "Nachvollziehbarkeit" am Beispiel der hier betrachteten Konfiguration des Modells METRAS.110	.110
Tabelle 5-2 <i>Basisvalidierung</i> , Kriterium " Realisierungsgüte " am Beispiel der hier betrachteten Konfiguration des Modells METRAS.111	.111

Tabelle 5-3	Maximale Abweichungen zwischen verschiedenen Modellergebnissen für die Modellanwendungen 3.2.1 (Windprofile über homogenem Gelände) nach 6 Stunden Simulationszeit.	113
Tabelle 5-4	Ergebnisse der Bergüberströmungen im Vergleich zu den Erwartungswerten nach 9 Stunden Simulationszeit.	115
Tabelle 5-5:	Modellergebnisse und Erwartungswerte für eine Seewindzirkulation ohne Wolkeneinfluß.	116
Tabelle C-1	Verhältnis von nichthydrostatischer und hydrostatischer Druckgradientkraft am Beispiel verschiedener mesoskaliger Phänomene.....	130
Tabelle D-1	Verhältnis der numerisch und durch einen Drei-Punkt-Filter bedingten horizontalen Diffusionskoeffizienten zum physikalisch bedingten Diffusionskoeffizienten.	133
Tabelle E-1	Verhältnis der einzelnen Terme in der Bewegungsgleichung zur horizontalen Druckgradientkraft.....	136
Tabelle F-1	Dimensionslose Kennzahlen mit ihrer Definition und kritischen Werten.	137
Tabelle H-1	Berücksichtigte Modelle und Literaturhinweise.	142
Tabelle H-2	In den berücksichtigten Modellen verwendete Gleichungen und Approximationen.	143
Tabelle H-3	In den berücksichtigten Modellen verwendete Parametrisierungen.....	145
Tabelle H-4	In den berücksichtigten Modellen verwendete Randbedingungen und sonstige Modelleigenschaften.....	145

SYMBOLVERZEICHNIS

Die Bedeutung der zusammengesetzten Symbole (z.B. \bar{u}) ist durch Zusammensetzen der Bedeutungen des Basissymbols (im Beispiel u) und einer beliebigen Zustandsvariablen Ψ zu ermitteln; z.B. bezeichnet \bar{u} den mittleren Wert der Komponente des Windvektors in x-Richtung.

α	Anpassungskoeffizient ("Nudging-Coefficient")
α_χ	Koeffizient der Profilkfunktionen Ψ_χ
α_q	Sättigungsgrad des Bodens
β	Rosbyparameter
β_χ	Koeffizient der Profilkfunktion Ψ_χ
β_m	Koeffizient der Profilkfunktion Ψ_m
Γ	Gegen den Temperaturgradienten gerichteter Temperaturtransportterm
γ_χ	Koeffizient der Profilkfunktionen Ψ_χ
γ_m	Koeffizient der Profilkfunktionen Ψ_m
$\Delta\rho$	Dichteunterschied
Δt	Zeitschritt bzw. Zeitintervall
Δx	Gitterweite in x-Richtung
Δx_i	Gitterweite in Raumrichtung i
Δy	Gitterweite in y-Richtung
Δz	Gitterweite in z-Richtung
ΔU	Fehler in der Windgeschwindigkeit
ΔT	Fehler in der Temperatur
δ	Stromlinienverschiebung
δT	charakteristischer Temperaturgradient
d_{ij}	Kroneckerdelta
ε	Dissipation
η	Vertikalkoordinate im bodenfolgenden Koordinatensystem
θ	potentielle Temperatur
θ_*	Skalengröße für die Temperatur
θ_v	virtuelle potentielle Temperatur
κ	von-Kármán-Konstante
λ	Wirbelgröße
λ_b	Wellenlänge von Schwerewellen

λ_s	Wellenlänge einer Auftriebsbewegung
λ_f	Wellenlänge einer Trägheitsschwingung
ν	kinematische Zähigkeit ($\sim 1.5E-5m^2/s$)
ν_s	thermische Leitfähigkeit des Bodens
ρ	Dichte der Luft
ρ_Q	Dichte der Luft im Quellvolumen
ρ_s	Dichte des Bodens
ρ_w	Dichte des Wassers
σ	Vertikalkoordinate im bodenfolgenden Druckkoordinatensystem
σ_2	laterale Standardabweichung
σ_3	vertikale Standardabweichung
Φ	Geopotential
ϕ_χ	Profilfunktion für eine skalare Größe
ϕ_m	Profilfunktion für Impuls
φ	geographische Breite
φ_0	Bezugsbreite
χ	beliebige skalare Größe
χ^*	Skalengröße für χ
Ψ	beliebige Zustandsvariable
Ψ'	Fluktuation einer beliebigen Zustandsvariablen
Ψ_0	Grundzustand einer beliebigen Zustandsvariable
Ψ_f	beliebige Zustandsvariable als forcierte Lösung eines Modells
Ψ_g	beliebige Zustandsvariable als Lösung eines grobauflösenden Modells
Ψ_h	beliebige Zustandsvariable als Lösung eines hochauflösenden Modells
$\bar{\Psi}$	mittlerer Wert einer beliebigen Zustandsvariablen
$\bar{\Psi}^\square$	Gebietsmittelwert einer beliebigen Zustandsvariablen mesoskaliger Anteil einer beliebigen Zustandsvariablen
Ψ_s	beliebige Zustandsvariable am Boden
Ψ_χ	Stabilitätsfunktion für skalare Größen
Ψ_m	Stabilitätsfunktion für Impuls
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erde (Vektor)
Ω	Betrag der Winkelgeschwindigkeit der Erde
ω	Vertikalgeschwindigkeit im p-System
$\square t$	Zeitintervall zur Berechnung von Ψ_0
$\square x$	Integrationsgebiet in x-Richtung zur Berechnung von Ψ_0
$\square y$	Integrationsgebiet in y-Richtung zur Berechnung von Ψ_0
$\square z$	Integrationsgebiet in z-Richtung zur Berechnung von Ψ_0

∇	Nablaoperator
∇_p	Nablaoperator im p-System
∇^2	Laplace-Operator
A_w	Auswaschkoeffizient
a_α	Faktor zur Berechnung des Anpassungskoeffizienten α
a_1 bis 5	Koeffizienten beim Ansatz nach Dunst
C	Konzentration von Luftbeimengungen
C_{\max}	Maximalkonzentration
Co	Courantzahl
C_1 bis 2	Konzentration von Tracer 1 oder 2
c_p	spezifische Wärme bei konstantem Druck (trockene Luft)
c_{pm}	spezifische Wärme bei konstantem Druck (Mischung feuchter Luft)
c_s	spezifische Wärmekapazität des Bodens
c_v	spezifische Wärme bei konstantem Volumen
c_1	Koeffizient im Mischungswegansatz
c_2	Koeffizient im Prandtl-Kolmogorov-Ansatz
c_3 bis 6	Koeffizienten im ϵ -Ansatz
	Abweichung der Mittelwerte
D_i	Abweichung zwischen zwei Werten
D_{\max}	maximale Abweichung
d_1	Koeffizient beim gegen den Gradienten gerichteten Transportterm Γ
d_2	bodennahe Schubspannungsgeschwindigkeit bei freier Konvektion
E	turbulente kinetische Energie
e	spezifische innere Energie
F	molekulare Reibung
F_χ	Divergenz der molekularen Flüsse der Größe χ
F_θ	Divergenz der molekularen Wärmeflüsse
F_D	trockene Deposition (Fluß)
Fr	Froudezahl
Fr_d	densimetrische Froudezahl
F_w	nasse Deposition (Fluß)
f	Coriolisparameter ($2 \Omega \sin \varphi$)
f'	$2 \Omega \cos \varphi$
f_{oi}	prozentualer Anteil der i-ten Bodennutzungs-kategorie in einem Gittervolumen
f_0	Coriolisparameter in Bezugsbreite φ_0
f_1	Funktion zur Berücksichtigung des Stabilitätseinflusses im Mischungswegansatz
f_2	Faktor in der analytischen Lösung für eine Bergüberströmung

g	Schwerebeschleunigung
H	Quellhöhe
H_p	Skalenhöhe der isothermen Atmosphäre
H_n	Grenzschichthöhe bei neutraler Schichtung
h	spezifische Enthalpie
h_θ	Eindringtiefe der Temperaturwelle in den Boden
h^i	spezifische Enthalpie in der i -ten Phase
l_h	Quotient von Horizontaladvektion und Druckgradientkraft
l_v	Quotient von Vertikaladvektion und Druckgradientkraft
$K_{\theta v}$	vertikaler Diffusionskoeffizient für Wärme
$K_{\chi ij}$	Diffusionskoeffizienten einer skalaren Größe χ
$K_{\Psi 22}$	lateral Diffusionskoeffizient für eine Zustandsvariable Ψ
$K_{\Psi 33}$	vertikaler Diffusionskoeffizient für eine Zustandsvariable Ψ
K_{Ei}	Diffusionskoeffizienten der turbulenten kinetischen Energie
K_{Numerik}	durch das numerische Verfahren bedingter Diffusionskoeffizient
K_{mh}	horizontaler Diffusionskoeffizient für Impuls
K_{mij}	Tensor der Diffusionskoeffizienten für Impuls (Komponenten i, j des Windvektors)
K_{mv}	vertikaler Diffusionskoeffizient für Impuls
K_{Filter}	durch den Filter bedingter Diffusionskoeffizient
\mathbf{k}	Ortsvektor
L	Monin-Obukhov-Länge
L_i	Monin-Obukhov-Länge der i -ten Bodennutzungs-kategorie
L_x	charakteristische Horizontalausdehnung eines Phänomens
L_z	charakteristische Vertikalausdehnung eines Phänomens
L_{xb}	Halbwertsbreite eines Berges
L_{zb}	Scheitelhöhe eines Berges
l	Mischungsweglänge
l_{12}	latente Wärme bei Kondensation
l_{13}	latente Wärme bei Sublimation
m_i^k	i -te Partialmasse in der Phase gasförmig ($k=1$), flüssig ($k=2$) oder fest ($k=3$)
N	Brunt-Väisälä-Frequenz
O_i	Stichprobe von Messungen
P	Niederschlagsmenge
P_i	Stichprobe von Modellergebnissen
Pr	Prandtlzahl
p	Druck
p_∞	Bezugsdruck 1000 hPa

p_{hy}	hydrostatischer Druckanteil
p_{nh}	nichthydrostatischer Druckanteil
Q_{χ}	Quellen und Senken der Größe χ
Q_{θ}	Quellen und Senken für Wärme
Q_{Ant}	anthropogene Wärmequellen
Q_G	Wärmefluß in den Boden
Q_L	latenter Wärmefluß
Q_R	Bilanz der kurz- und langwelligen Strahlungsflüsse
Q_S	fühlbarer Wärmefluß
$Q_{S\chi}$	Quellstärke für Stoff χ
$Q_{S1 \text{ bis } S2}$	Quellstärke für Tracer 1 oder Tracer 2
Q_{SC}	Quellstärke für einen Stoff
\hat{q}	geänderte Wärmemenge
q_1^{2C}	Wolkenwasser
q_1^1	spezifische Feuchte
q_{1sat}^{1Eis}	Sättigung über Eis
$q_{1sat}^{1Wasser}$	Sättigung über Wasser
q_1^2	Flüssigwasser (Partialmasse)
q_1^3	Eis (Partialmasse)
q_*	Skalengröße für Feuchte
q_{1sat}^1	Sättigungsfeuchte
q_1^{2R}	Regenwasser
$r_1 \text{ bis } 2$	Koeffizienten zur Festlegung des Verhältnisses horizont./vertik. Diffusionskoeffizient
R	Strahlungsflüsse in der Atmosphäre
R	Gaskonstante für trockene Luft
R_a	Widerstand der Atmosphäre (trockene Deposition)
R_{OP}	Korrelationskoeffizient
Re	Reynoldszahl
Re_{turb}	turbulente Reynoldszahl
Re_*	Reynoldszahl der kleinsten Wirbel
R_i	Gaskonstante der Partialmassen im Luftgemisch
R_{iB}	Richardson'sche Zahl (Bulk-Formulierung)
R_i	Richardson'sche Zahl
RMSE	mittlerer quadratischer Fehler
R_m	Gaskonstante der Mischung feuchter Luft
$R_{m\chi}$	Widerstand der viskosen Schicht (trockene Deposition) für einen Stoff χ
Ro	Rosbyzahl

$R_{0\chi}$	Widerstand der Oberfläche (trockene Deposition)
R_1^1	Gaskonstante für Wasserdampf
S_Ψ	Standardabweichung von Ψ
T	absolute Temperatur
t	Zeit
T_c	charakteristische Zeitdauer eines Phänomens
T_v	virtuelle Temperatur
U	Betrag der Windgeschwindigkeit bzw. charakteristische Horizontalgeschwindigkeit
U_{front}	Verlagerungsgeschwindigkeit einer Seewindfront
u	Komponente des Windvektors in x-Richtung
u_i	i-te Komponente des Windvektors
u^*	Schubspannungsgeschwindigkeit
V	Volumen
V_Q	Quellvolumen
\mathbf{v}	dreidimensionaler Geschwindigkeitsvektor
v	Komponente des Windvektors in y-Richtung
$V_{D\chi}$	Depositionsgeschwindigkeit für einen Stoff χ (trockene Deposition)
\mathbf{v}_g	Vektor des geostrophischen Windes
\mathbf{v}_h	horizontaler Geschwindigkeitsvektor
V_{TR}	Fallgeschwindigkeit von Regentropfen
W	charakteristische Vertikalgeschwindigkeit
W_k	möglicher Wassergehalt des Bodens
W_s	aktueller Wassergehalt des Bodens
w	Vertikalwind
w_a	geleistete Arbeit
w_*	Skalengröße bei freier Konvektion (free convection velocity)
x	horizontale Koordinate (West-Ost Richtung)
$x(C_{\text{max}})$	Ort der Maximalkonzentration am Boden
y	horizontale Koordinate (Süd-Nord-Richtung)
z	Vertikalkoordinate
z_a	Anpassungshöhe für verschiedene Formulierungen des Diffusionskoeffizienten
z_i	Grenzschichthöhe
z_s	Topographiehöhe
z_t	Höhe des oberen Randes eines Modells
z_0	Rauhigkeitslänge für Impuls
z_{0i}	Rauhigkeitslänge der i-ten Bodennutzungs-kategorie
$z_{0\chi}$	Rauhigkeitslänge für skalare Größe

LITERATURVERZEICHNIS

- Adrian G. (1985):** Ein Initialisierungsverfahren für numerische mesoskalige Strömungsmodelle. *Wiss. Ber. Inst. f. Met. u. Klimaf., Univ. Karlsruhe*, **5**.
- Adrian G. (1988):** Synthetic wind climatology evaluated by the non-hydrostatic numerical mesoscale model KAMM. in: Grefen, K. und J. Löbel (eds.). *Environmental Meteorology*, Kluwer Academic Publishers, 397 - 411.
- Adrian G. (1994):** Zur Dynamik des Windfeldes über orographisch gegliedertem Gelände. *Ber. Deutscher Wetterdienst*, **188**, pp 141.
- Adrian G. (1995):** On similarity laws in regional climatology. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **165**, 223 - 234.
- Adrian G. und Fiedler F. (1991):** Simulation of unstationary wind and temperature fields over complex terrain and comparison with observations. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **64**, 27 - 48.
- Alheit R.R. und Hauf T. (1992):** Vertical transport of trace species by thunderstorms - a transient transport model. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **96**, 501 - 510.
- André J.C., DeMoor G., Lacarrère P., Therry G. und DuVachat R. (1978):** Modelling the 24-hour evolution of the planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 1861 - 1883.
- Arritt R.W., Pielke R.A. und Segal M. (1988):** Variations of sulfur dioxide deposition velocity resulting from terrain-forced mesoscale circulations. *Atmos. Environ.*, **22**, 715 - 723.
- Atkinson B.W. (1981):** Meso-scale atmospheric circulations. *Academic Press, London*, pp 495.
- Avissar R., Moran M.D., Wu G., Meroney R.N. und Pielke R.A. (1990):** Operating ranges of mesoscale numerical models and meteorological wind tunnels for the simulation of sea and land breezes. *Boundary-Layer Meteorol.*, **50**, 227 - 275.
- Bakan S. (1995):** A simple radiation parameterization for use in mesoscale models. *Interner Bericht, Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg*, **in Vorbereitung**, pp 37.
- Bao J.W. und Seaman N.L. (1994):** Grid-scale dependency of convective parameterization: the Fritsch-Chappell scheme. *10th Conference on "Numerical Weather Prediction"*, Juli 18-22, 1994, Portland, Oregon, **P2.10**, 251 - 253.
- Beheng K.D. (1986):** On the effect of various drop size spectra on the spectral scavenging coefficient calculated by an approximate semi-analytical scheme. *Meteorologische Rdsch.*, **39**, 93 - 97.
- Benoit R., Côté J. und Mailhot J. (1989):** Inclusion of a TKE boundary layer parameterization in the Canadian regional finite-element model. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1726 - 1750.
- Bernhardt K. (1991):** Zur Scale-Analyse nichthydrostatischer Effekte im mesometeorologischen Bereich. *Zeitschr. f. Meteorol.*, **41**, 98 - 104.
- Bigalke K. (1991):** Interaktive Modellkopplung zur Berücksichtigung heißer Punktquellen in Gitterpunktsmodellen und Einfluß der Kopplungsstufe auf die Immission. *Berichte aus dem ZMK, Meteorologisches Institut, Universität Hamburg*, **12**, pp 141.
- Bigalke K. (1992):** A new method for incorporating point sources in Eulerian dispersion models. In: *van Dop, H. and Kallos, G. (ed): Air Pollution Modelling and its Application*, Plenum Press Publishing Corporation, New York, **Vol. IX**, 651 - 660.
- Bigalke K. und Schatzmann M. (1989):** Berechnung der Anfangsbedingungen für den Stofftransport in mesoskaligen Zirkulationsmodellen. *GKSS 89/E/24, GKSS Forschungszentrum, Geesthacht*, pp 231.

- Bigalke K. und Schatzmann M. (1994):** Entwicklung eines Verfahrens zur ereignisabhängigen Probenahme und verallgemeinernden Interpretation von Messungen der nassen Schadstoffdeposition über Meeresoberflächen. *Abschlußbericht zum BMFT-Forschungsvorhaben 03F0037A*, pp 93.
- Blackadar A.K. (1962):** The vertical distribution of wind and turbulent exchange in a neutral atmosphere. *J. Geophys. Res.*, **67**, 3095 - 3102.
- Bott A. (1989):** A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of advective fluxes. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1006 - 1015.
- Bougeault P. (1983):** A non-reflective upper boundary condition for limited-height hydrostatic models. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 420 - 429.
- Bougeault P., Jansa Clar A., Attié J. L., Beau I., Bénech B., Benoit R., Bessemoulin P., Caccia J. L., Campins J., Carissimo B., Champeaux J. L., Crochet M., Druilhet A., Durand P., Elkhalfi A., Flamant P., Genoves A., Georgelin M., Hoinka K.P., Klaus V., Koffi E., Kotroni V., Mazaudier C., Pelon J., Petitdidier M., Pointin Y., Puech D., Richard E., Satomura T., Stein J. und Tannhauser D. (1993):** The atmospheric momentum budget over a major mountain range: First results of the PYREX field program. *Ann. Geophysicae*, **11**, 395 - 418.
- Brier G. W. und Allen R. A. (1951):** Verification of weather forecasts. *Compendium of Meteorology*, 841 - 848.
- Brockhaus (1985):** Lexikon und Wörterbuch in 5 Bänden und einem Atlas. *F.A. Brockhaus GmbH, Wiesbaden, 7. Aufl., Band 5*.
- Brümmer B. (1990):** FRONTEX 1989 - Frontexperiment im norddeutschen Küstenbereich. Bericht über die Feldmessungen mit einigen Meßbeispielen. *Hamb. Geophys. Einzelschr.*, **B7**, pp 175.
- Brümmer B., Hennemuth B., Rhodin A., Rose L., Hessel J. und Siemer A. (1990):** Flugzeugmessungen. *Hamb. Geophys. Einzelschr.*, **B7**, 21 - 69.
- Brutsaert W. (1975):** The roughness length for water vapor, sensible heat, and other scalars. *J. Atmos. Sci.*, **32**, 2028 - 2031.
- Busch N.E. (1973):** On the mechanics of atmospheric turbulence. In: *Haugen D.A. (ed.): "Workshop on Micrometeorology", American Meteorological Society, Boston*, 1 - 65.
- Businger J.A. (1973):** A note on free convection. *Boundary-Layer Meteorol.*, **4**, 323 - 326.
- Businger J.A. (1982):** The fluxes of specific enthalpy, sensible heat and latent heat near the earth's surface. *J. Atmos. Sci.*, **39**, 1889 - 1892.
- Businger J.A., Wyngaard J.C., Izumi Y. und Bradley E.F. (1971):** Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.*, **28**, 181 - 189.
- Carpenter K. (1979):** An experimental forecast using a non hydrostatic mesoscale model. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **105**, 629 - 655.
- Chang J.S., Brost R.A., Isaksen I.S.A., Madronich S., Middleton P., Stockwell W.R. und Walcek C.J. (1987):** A Three-dimensional Eulerian acid deposition model: physical concepts and formulation. *J. Geophys. Res.*, **92**, 14681 - 14700.
- Chaumerliac N., Richard E., Pinty J.-P. und Nickerson E.C. (1987):** Sulfur scavenging in a mesoscale model with quasi-spectral microphysics: two-dimensional results for continental and maritime clouds. *J. Geophys. Res.*, **92**, 3114 - 3126.
- Chaumerliac N, Richard E. und Rosset R. (1990):** Mesoscale modeling of acidity production in orographic clouds and rain. *Atmos. Environ.*, **24A**, 1573 - 1584.
- Chlond A. (1992):** Three-dimensional simulation of cloud street development during a cold air outbreak. *Boundary-Layer Meteorol.*, **58**, 161 - 200.
- Chrobok G., Raasch S. und Etling D. (1992):** A comparison of local and non-local turbulence closure methods for the case of a cold air outbreak. *Boundary-Layer Meteorol.*, **58**, 69 - 90.
- Clark R. H., Dyer A. J., Brook P. R., Reid D. G. und Troup A. J. (1971):** The Wangara Experiment: Boundary layer data. *Technical paper 19, CSIRO Division of Atmospheric Research, Mordialloc*, pp 340.

- Clark T. und Farley R. D. (1984):** Severe downslope windstorm calculations in two and three dimensions using anelastic interactive grid nesting: A possible mechanism for gustiness. *J. Atmos. Sci.*, **41**, 329 - 350.
- Clark T.L. (1977):** A small-scale dynamic model using a terrain following coordinate transformation. *J. Comp. Phys.*, **24**, 186 - 215.
- Clark T.L. und Gall R. (1982):** Three-dimensional numerical model simulations of airflow over mountainous terrain: a comparison with observations. *Mon. Wea. Rev.*, **110**, 766 - 791.
- Clark T.L. und Hall W.D. (1991):** Multi-domain simulations of the time dependent Navier-Stokes equations: benchmark error analysis of some nesting procedures. *Comp. Physics*, **92**, 456 - 480.
- Claussen M. (1991a):** Estimation of areally-averaged surface fluxes. *Boundary-Layer Meteorol.*, **54**, 387 - 410.
- Claussen M. (1991b):** Die bodennahe Luftströmung über inhomogenen Oberflächen. *Habilitationsschrift, Examensarbeit, Max-Planck-Institut für Meteorologie*, **13**, pp 148.
- Côté J., Gravel S. und Staniforth A. (1990):** Improving variable-resolution finite-element semi-Lagrangian integration schemes by pseudostaggering. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 2718 - 2731.
- Côté J., Roch M., Staniforth A. und Fillion L. (1993):** A variable-resolution semi-Lagrangian finite-element global model of the shallow-water equations. *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 231 - 243.
- Davies H.C. (1976):** A lateral boundary formulation for multilevel prediction models. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **102**, 405 - 418.
- de Jong B. (1973):** Net radiation received by a horizontal surface at the earth. *Delft University Press*, pp 51.
- Deardorff J.W. (1972):** Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. *J. Atmos. Sci.*, **29**, 91 - 115.
- Deardorff J.W. (1973):** Three-dimensional numerical modeling of the planetary boundary layer. In: *D.A. Haugen (ed.): "Workshop on Micrometeorology", American Meteorological Society, Boston*, 271 - 311.
- Deardorff J.W. (1978):** Efficient prediction of ground surface temperature and moisture, with inclusion of a layer of vegetation. *J. Geophys. Res.*, **83**, 1889 - 1903.
- Defant F. (1950):** Theorie des Land- und Seewindes. *Arch. Met. Geoph. Biokl.*, **A2**, 404 - 425.
- Degrazia G.A. (1989):** Anwendung von Ähnlichkeitsverfahren auf die turbulente Diffusion in der konvektiven und stabilen Grenzschicht. *Wiss. Ber. Inst. f. Met. u. Klimaf., Univ. Karlsruhe*, **12**, pp 98.
- Delage Y. (1988):** A parameterization of the stable atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **43**, 365 - 381.
- Delage Y. und Girard C. (1992):** Stability functions correct at the free convection limit and consistent for both the surface and Ekman layers. *Boundary-Layer Meteorol.*, **58**, 19 - 31.
- Detering H.W. (1985):** Mischungsweg und turbulenter Diffusionskoeffizient in atmosphärischen Strömungsmodellen. *Ber. Inst. f. Met. u. Klimat. Univ. Hannover*, **25**, pp 211.
- Detering H.W. und Etling D. (1985):** Application of the E-epsilon turbulence model to the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **33**, 113 - 133.
- Doms G. und Herbert F. (1985):** Fluid- und Mikrodynamik in numerischen Modellen konvektiver Wolken. *Ber. Inst. f. Met. u. Klimat. Univ. Frankfurt/Main*, **62**, pp 378.
- Dovland H. und Eliassen A. (1976):** Dry deposition on a snow surface. *Atmos. Environ.*, **10**, 783 - 785.
- Dudhia J. (1993):** A nonhydrostatic version of the Penn State-NCAR mesoscale model: validation tests and simulation of an atlantic cyclone and cold front. *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 1493 - 1513.
- Dunst M. (1980):** Ergebnisse von Modellrechnungen zur Ausbreitung von Stoffbeimengungen in der planetarischen Grenzschicht. *Zeitschr. f. Meteorol.*, **30**, 47 - 59.

- Dunst M. (1982):** On the vertical structure of the eddy diffusion coefficient in the PBL. *Atmos. Environ.*, **16**, 2071 - 2074.
- Dunst M. und Rhodin A. (1990):** On the influence of frictional effects on surface fronts. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **63**, 223 - 242.
- Durran D.R. (1981):** The effects of moisture on mountain lee waves. *NCAR-CT-65; Massachusetts Inst. of Technology and NCAR; cooperative Thesis Nr.65*, pp 140.
- Dutton J.A. (1976):** The Ceaseless Wind. *Mc Graw Hill, New York*, pp 579.
- Dutton J. A. und Fichtel G. H. (1969):** Approximate equations of motion for gases and liquids. *J. Atmos. Sci.*, **26**, 241 - 254.
- Dyer A.J. (1974):** A review of flux-profile relationship. *Boundary-Layer Meteorol.*, **7**, 363 - 372.
- Dyer A.J. und Bradley E.F. (1982):** An alternative analysis of flux-gradient relationships at the 1976 ITCE. *Boundary-Layer Meteorol.*, **22**, 3 - 19.
- Dyer A.J. und Hicks B.B. (1970):** Flux-gradient relationships in the constant flux layer. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **96**, 715 - 721.
- Emeis S. (1994):** Bestimmung und Parametrisierung des Druckwiderstandes an Hindernissen in der atmosphärischen Grenzschicht. *Ber. Deutscher Wetterdienst*, **191**, pp 189.
- Eppel D., Kapitza H., Claussen M., Jacob D., Levkov L., Mengelkamp H.-T. und Werrmann N. (1995):** The non-hydrostatic model GESIMA: Part II: parameterizations and application. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **68**, 15 - 41.
- Estoque M.A. (1962):** The sea-breeze as a function of the prevailing situation. *J. Atmos. Sci.*, **19**, 244 - 250.
- Etling D. (1987):** The planetary boundary layer PBL. In: *Landlot-Börnstein: "Meteorology", Group V, Volume 4, Subvolume c1, Climatology, part 1*, 151 - 188.
- Falke M., Jeske H. und Lesch L. (1990):** Radiosondenmessungen. In: B. Brümmer (ed.): "FRONTEX 1989. Frontenexperiment im norddeutschen Küstenbereich. Bericht über die Feldmessungen mit einigen Meßbeispielen." *Hamb. Geophys. Einzelschr.*, **B 7**, 7 - 20.
- Fiedler F. und Panofsky H.A. (1970):** Atmospheric scales and spectral gaps. *Bull. Am. Met. Soc.*, **51**, 1114 - 1119.
- Finkele K. (1994):** Numerical simulations and aircraft measurements of sea breezes. *A thesis submitted to the School of Earth Sciences, The Flinders University of South Australia for the degree of Doctor of Philosophy*, pp 150.
- Fisher E.H. und Rhodes N. (1994):** Uncertainty in computational fluid dynamics. *EPSRC/I.Mech.E. Expert Meeting, Bournemouth, 27-29th. November, 1994*, pp 8.
- Flassak T. (1990):** Ein nicht-hydrostatisches mesoskaliges Modell zur Beschreibung der Dynamik der planetaren Grenzschicht. *VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf, Reihe 15 Heft 74*, pp 203.
- Flossmann A.I. (1994):** Inventory of cloud, fog and/or scavenging models. *EUROTRAC cloud group. LAMP/CNRS, Univers. Blaise Pascal, Aubière Cedex, France, 2nd version, 29 models*, pp 29.
- Flossmann A.I. und Pruppacher H.R. (1988):** A theoretical study of the wet removal of atmospheric pollutants. Part III: The uptake, redistribution, and deposition of (NH₄)₂SO₄ particles by a convective cloud using a two-dimensional cloud dynamics model. *J. Atmos. Sci.*, **45**, 1857 - 1871.
- Garratt J.R. (1992):** Extreme maximum land surface temperatures. *J. Appl. Met.*, **31**, 1096 - 1105.
- Garratt J.R. und Hicks B.B. (1973):** Momentum, heat and water vapour transfer to and from natural and artificial surfaces. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **99**, 680 - 687.
- Garratt J. R. und Hicks B. B. (1990):** Micrometeorological and PBL experiments in Australia. *Boundary-Layer Meteorol.*, **50**, 11 - 29.
- Gates W.L., Mitchell J.F.B., Boer G.J., Cubasch U. und Melseshko V.P. (1992):** Climate modelling, climate prediction and model validation. In: *Houghton, J.T., Callander, B.A., Varney, S.K. (eds.): Climate Change 1992 - The supplementary report to the IPCC scientific assessment, Cambridge University Press, Cambridge*, 97 - 134.

- Gates W.L., Rowntree P.R. und Zeng Q.-C. (1990):** Validation of climate models. In: Houghton, J.T., Jenkins, G.J., Ephraums, J.J. (eds.): *Climate Change - The IPCC scientific assessment*, Cambridge University Press, Cambridge, 93 - 130.
- Golchert H.J. (1981):** Mittlere monatliche Globalstrahlungsverteilungen in der Bundesrepublik Deutschland. *Meteorologische Rdsch.*, **34**, 143 - 151.
- Grell G.A., Dudhia J. und Stauffer D.R. (1993):** A description of the Fifth-generation Penn. State/NCAR mesoscale model (MM5). *Final Draft. NCAR Technical Note, NCAR/TN-398+IA*, pp 107.
- Groß G. (1986):** A numerical study of the land and sea breeze including cloud formation. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **59**, 97 - 114.
- Groß G. (1987):** Some effects of deforestation on nocturnal drainage flow and local climate - a numerical study. *Boundary-Layer Meteorol.*, **38**, 315 - 337.
- Groß G. (1988):** A numerical estimation of the deforestation effects on local climate in the area of the Frankfurt International Airport. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **61**, 219 - 231.
- Groß G. (1989):** Numerical simulation of the nocturnal flow systems in the Freiburg area for different topographies. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **62**, 57 - 72.
- Groß G. (1991):** Anwendungsmöglichkeiten mesoskaliger Simulationsmodelle dargestellt am Beispiel Darmstadt. Teil I: Wind- und Temperaturfelder. *Meteorologische Rdsch.*, **43**, 97 - 112.
- Groß G. (1994):** Statistical evaluation of the mesoscale model results. In: R.A. Pielke, R.P. Pears (eds.) *"Mesoscale modelling of the Atmosphere"*, Am. Met. Soc., Meteorol. Monographs, Vol. 25, **74**, 137 - 154.
- Groß G. und Etling D. (1984):** Mesoskalige Simulationsmodelle - ein Vergleich. *Bericht für den Wissenschaftlichen Beirat des DWD*, pp 17.
- Groß G., Vogel H. und Wippermann F. (1987):** Dispersion over and around a steep obstacle for varying thermal stratification -numerical simulations. *Atmos. Environ.*, **21**, 483 - 490.
- Hales J. (1987):** Wet scavenging processes. *Reprints of 16th Intern. Meeting on Air Pollution Modeling and its Applications, April 6-10, 1987 Lindau, Invited papers II*.
- Haltiner G.J. und Martin F.L. (1957):** Dynamical and physical meteorology. McGraw-Hill Book Company, New York, Toronto, London, pp 470.
- Haltiner G.J. und Williams R.T. (1980):** Numerical prediction and dynamic meteorology. 2nd ed. Wiley & Sons, New York, pp 477.
- Hanna S.R. (1982):** Applications in air pollution modelling. *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling*, eds. F.T.M. Nieuwstadt, H. van Dop, D. Reidel Publ. Comp, Dordrecht, 275 - 310.
- Hass H. (1991):** Description of the EURAD chemistry-transport-model version 2 (CTM2). *Mitteilungen a. d. Inst. f. Geophysik u. Meteorologie d. Univ. zu Köln*, **83**, pp 110.
- Hass H., Ebel A., Feldmann H., Jakobs H.J. und Memmesheimer M. (1993):** Evaluation studies with a regional chemical transport model (EURAD) using air quality data from the EMEP monitoring network. *Atmos. Environ.*, **27A**, 867 - 887.
- Herrmann K. (1994):** Zum Gültigkeitsbereich des Konzepts der Blendhöhe in einem mesoskaligen Modell - Ein Beitrag zur Parametrisierung bodennaher Flüsse -. *Diplomarbeit, Fachbereich Physik, Universität Hamburg*, pp 99.
- Hertel O., Christensen J., Runge E.H., Asman W.A.H., Berkowicz R. und Hovmand M.F. (1995):** Development and testing of a new variable scale air pollution model - ACDEP. *submitted to Atmos. Environ.*, pp 36.
- Hess G.D., Carnovale F., Cope M.E. und Johnson G.M. (1992a):** The evaluation of some photochemical smog reaction mechanisms - I. Temperature and initial composition effects. *Atmos. Environ.*, **26A**, 625 - 641.
- Hess G.D., Carnovale F., Cope M.E. und Johnson G.M. (1992b):** The evaluation of some photochemical smog reaction mechanisms - II. Initial addition of alkanes and alkenes. *Atmos. Environ.*, **26A**, 643 - 651.

- Hess G.D., Carnovale F., Cope M.E. und Johnson G.M. (1992c):** The evaluation of some photochemical smog reaction mechanisms - III. Dilution and emissions effects. *Atmos. Environ.*, **26A**, 653 - 659.
- Hess G. D., Hicks B. B. und Yamada T. (1981):** The impact of the Wangara Experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **20**, 135 - 174.
- Hicks B.B. (1976):** Wind profile relationships from the 'Wangara' experiment. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **102**, 535 - 551.
- Hicks B. B. (1981):** An analysis of Wangara Micrometeorology: surface stress, sensible heat, evaporation and dewfall. *NOAA Technical Memorandum ERL / ARL-104*, pp 36.
- Hicks B.B., Meyers T.P., Fairall C.W., Mohnen V.A. und Dolske D.A. (1989):** Ratios of dry to wet deposition of sulfur as derived from preliminary field data. *Global Biogeochemical Cycles*, **3**, 155 - 162.
- Hinze J.O. (1959):** Turbulence. *McGraw-Hill Book Company, Inc., New York*, pp 586.
- Högström U. (1988):** Non-dimensional wind and temperature profiles in the atmospheric surface layer: a re-evaluation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **42**, 55 - 78.
- Höllner H. (1986):** Parameterization of cloud-microphysical process in a three-dimensional convective mesoscale model. *DFVLR-Forschungsbericht*, **86-02**.
- Holtlag A.A.M. und Boville B.A. (1993):** Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model. *J. Climate*, **6**, 1825 - 1842.
- Holtlag A.A.M. und Moeng C.H. (1991):** Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **48**, 1690 - 1698.
- Hosker R. (1984):** Flow and diffusion near obstacles, in Atmospheric science and power production. *United States Department of Energy. DOE/TIC - 276001*, 241 - 326.
- Hunt J. und Simpson J.E. (1982):** Atmospheric boundary layers over non-homogenous terrain. In: *Plate, E.J. (ed.): Engineering Meteorology, Amsterdam Elsevier*, 269 - 318.
- Iversen T. (1993):** Modelled and measured transboundary acidifying pollutant in Europe - verification and trends. *Atmos. Environ.*, **27A**, 889 - 920.
- Jackson S.D. (1995):** A parameterization of surface heterogeneity for the UK Met. Office's unified model. *Ann. Geophysicae*, **13, Supplement II-C**, 297 - 297.
- Jaeschke W. (1986):** Multiphase atmospheric chemistry. In: *Jaeschke, W. (ed.): Chemistry of atmospheric systems, Springer Verlag, Berlin*, 3 - 40.
- Joffre S.M. (1988):** Modeling the dry deposition velocity of highly soluble gases to the sea surface. *Atmos. Environ.*, **22**, 1137 - 1146.
- Johnson D.E., Wang P.K. und Straka J.M. (1993):** Numerical simulations of the 2 August 1982 CCOPE supercell storm with and without ice microphysics. *J. Appl. Met.*, **32**, 745 - 759.
- Källberg P. (1977):** Test of a lateral boundary relaxation scheme in a barotropic model. *ECMWF, Research Department, Internal Report, Bracknell*, **3**.
- Kalmbach S. und Schmölling J. (1983):** Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft und Verordnung über Großfeuerungsanlagen: TA Luft mit Erläuterungen und 13. BImSchV mit amtlicher Begründung. *Erich Schmidt Verlag GmbH, Berlin*, pp 178.
- Kalthoff N., Schädler G., Fiedler F. und Adrian G. (1993):** Land surface processes over flat agricultural terrain: A comparison of measurements and simulation using LOTREX - 10E/HIBE88 data. *Meteorol. Zeitschrift*, **N. F. 2**, 51 - 69.
- Kapitza H. (1987):** Das dynamische Gerüst eines nicht-hydrostatische-Mesoskalen Modells der atmosphärischen Zirkulation. *GKSS 87/E/35 GKSS Forschungszentrum, D-2054 Geestacht*, pp 104.
- Kapitza H. (1991):** Numerical experiments with the adjoint of a nonhydrostatic mesoscale model. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 2993 - 3011.
- Kapitza H. und Eppel D. (1992):** The non-hydrostatic mesoscale model GESIMA. Part I: dynamic equations and tests. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **65**, 129 - 146.

- Keller J.U. (1977):** Thermodynamik der irreversiblen Prozesse, Teil 1: Thermostatik und Grundbegriffe. *de Gruyter, Berlin - New York*, pp 570.
- Kerkmann J. (1990):** Simulation orographisch beeinflusster Fronten mit einem Front-Skala Modell. Teil 2: Tests des Modells und Ergebnisse der Frontensimulationen. *Bonner Met. Abhandlungen*, **38**, pp 172.
- Kessler E. (1969):** On the distribution and continuity of water substance in atmospheric circulations. *Meteor. Monogr., No. 32, Amer. Meteor. Soc., Boston*, pp 82.
- Kinne S.A. und Bergstrom R.W. (1995):** Cloud inhomogeneity effects on one dimensional radiative transfer modeling. *Ann. Geophysicae*, **13, Supplement II-C**, 567 - 567.
- Klemp J.B. und Durran D.R. (1983):** An upper boundary condition permitting internal gravity wave radiation in numerical mesoscale models. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 430 - 444.
- Koch W. und Wippermann F. (1983):** Die Berücksichtigung der Wolken- und Niederschlagsphysik im Simulationsmodell FITNAH. *Forschungsbericht 27-10407354/02 i. A. des UBA*, pp 56.
- Koclas P., Staniforth A. und Warn H. (1986):** A variable-resolution finite-element model of frontogenesis. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 1340 - 1353.
- Köhler A. (1990):** Parameterisierung der Wolkenmikrophysik und der Strahlung in einem mesoskaligen Transport- und Strömungsmodell. *Diplomarbeit, Fachbereich Geowissenschaften, Universität Hamburg*, pp 96.
- Kondo J., Kanechika O. und Yasuda N. (1978):** Heat and momentum transfers and strong stability in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 1012 - 1021.
- Kramm G. (1989):** A numerical method for determining the dry deposition of atmospheric traces gases. *Boundary-Layer Meteorol.*, **48**, 157 - 175.
- Kurihara Y. und Bender M. A. (1983):** A numerical scheme to treat the open lateral boundary of a limited area model. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 445 - 454.
- Lehmann R. (1993):** On the choice of relaxation coefficients for Davies' lateral boundary scheme for regional weather prediction models. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **52**, 1 - 14.
- Levkov L., Jacob D., Eppel D. und Graßl H. (1989):** Test of a parametrization scheme for cloud microphysical processes in a 3-d mesoscale model. *Atmos. Res.*, **24**, 193 - 208.
- Lilly D.K. und Klemp J.B. (1979):** The effects of terrain shape on nonlinear hydrostatic mountain waves. *J. Fluid Mech.*, **95**, 241 - 261.
- Lim B., Jickells T.D. und Davies T.D. (1991):** Sequential sampling of particles, major ions and total trace metals in wet deposition. *Atmos. Environ.*, **25A**, 745 - 762.
- Little P. (1977):** Deposition of 2.75, 5.0 and 8.5 um particles to plant and soil surfaces. *Environ. Pollut.*, **12**, 293 - 305.
- Long R.R. (1953):** Some aspects of the flow of stratified fluids. I: A theoretical investigation. *Tellus*, **5**, pp 42.
- Louis J.-F. (1979):** A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorol.*, **17**, 187 - 202.
- Lüpkes C. (1991):** Untersuchungen zur Parametrisierung von Koagulationsprozessen niederschlagsbildender Tropfen. *Verlag Dr. Kovac, Hamburg*, pp 156.
- Lüpkes C., Beheng K.D. und Doms G. (1989):** A parameterization scheme for simulating collision/coalescence of water drops. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **62**, 289 - 306.
- Lüpkes C. und Schlünzen K.H. (1995):** Modelling the Arctic convective boundary layer with different turbulence parameterizations. *in Vorbereitung*.
- Lüpkes C., Schlünzen K.H., Birnbaum G. und von Salzen K. (1994):** Calculation of heat fluxes for arctic regions dependent on sea ice distribution. *Poster, Conference on the "Dynamics of the Arctic Climate system", Goteborg, Schweden, 7-10 November, 1994*.
- Lyck E., Voß W. und Veroustraete F. (1990):** Intercomparison of SF6-measurements between KFA, APL and SCK. *Forschungszentrum Jülich : Berichte Nr. 2388*, 230 - 233.

- Mahfouf J. R., Richard E., Mascard P., Nickerson E. C. und Rosset R. (1987):** A comparative study of various parameterizations of the Planetary Boundary Layer in a numerical mesoscale model. *J. Climate*, **26**, 1671 - 1695.
- Martens R. und Maßmeyer K. (1991):** Untersuchungen zur Verifizierung von komplexen Modellen zur Beschreibung des Schadstofftransportes in der Atmosphäre. *Gesellschaft für Reaktorsicherheit, Köln, GRS-A-1844*, pp 220.
- Martin A. (1984):** Estimated washout coefficients for sulphur dioxide, nitric oxide, nitrogen oxide and ozone. *Atmos. Environ.*, **18**, 1955 - 1961.
- Martin C.L. und Pielke R.A. (1983):** The adequacy of the hydrostatic assumption in sea breeze modeling over flat terrain. *Atm. Sci.*, **40**, 1472 - 1481.
- Mason P.J. und Sykes R.I. (1978):** A simple cartesian model of boundary layer flow over topography. *J. Comp. Phys.*, **28**, 198 - 210.
- Maßmeyer K., Martens R., Hofer E. und Krzykacz B. (1993):** Untersuchungen zur Verifizierung von komplexen Modellen zur Beschreibung des Schadstofftransportes. *Abschlußbericht - Hauptband, Anhänge 1-3,4,5 GRS, Köln, BMFT - Projekt RS816, GRS - A - 1985*, pp 460.
- McCormick, R.A. und Gutsche, B. (1969):** Meteorologie der Luftbeimengungen. *Inst. für Theoretische Meteorologie der Freien Univ. Berlin*, pp 126.
- McGann B.T. und Jennings S.G. (1991):** The efficiency with which drizzle and precipitation sized drops collide with aerosol particles. *Atmos. Environ.*, **25A**, 791 - 799.
- McGegor J.L., Gordon H.B., Watterson I.G., Dix M.R. und Rotstayn L.D. (1993):** The CSIRO 9-level atmospheric general circulation model. *CSIRO Div. Atm. Res Technical Paper*, **26**, pp 89.
- Mellor G.L. und Yamada T. (1974):** A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1791 - 1806.
- Mengelkamp H.-T. (1991):** Boundary Layer structure over an inhomogeneous surface: simulation with a non-hydrostatic mesoscale model. *Boundary-Layer Meteorol.*, **57**, 323 - 341.
- Mesinger F. und Arakawa A., (1976):** Numerical methods used in atmospheric models. *Garp Publications Series, No. 17, Volume I*, pp 64.
- Michaelis W., Pepelnik R., Rademacher P. und Riebesell M. (1990):** Wechselwirkung zwischen Luftschadstoffen und Vegetation. *Sonderdruck aus: GKSS Jahresbericht 1990, GKSS Forschungszentrum, D-2054 Geeshacht*, 42 - 55.
- Model Evaluation Group (1994):** Guidelines for Model Developers. *European Communities Directorate-General XII, Science Research and Development, Version 5*, pp 9.
- Mölders N. und Laube M. (1994):** A numerical study on the influence of different cloud treatment in a chemical transport model on gas phase distribution. *Atmos. Research*, **32**, 249 - 272.
- Möllmann- Coers M. und Vogt S. (1990):** A case study of the nocturnal night flow around an isolated hill using Tetroons and numerical simulations. *J. Geophys. Res.*, 669 - 678.
- Monin A.S. und Obukhov A.M. (1954):** Fundamentale Gesetzmäßigkeiten der turbulenten Vermischung in der bodennahen Schicht der Atmosphäre. *In: H. Goering (ed.) "Sammelband zur statistischen Theorie der Turbulenz"*, Berlin 1958, 199 - 266.
- Moussiopoulos N. (1989):** Mathematische Modellierung mesoskaliger Ausbreitung in der Atmosphäre. *Fortschr.-Ber. VDI, VDI-Verlag, Düsseldorf, Reihe 15, Heft 64*, pp 316.
- Moussiopoulos N. (1994):** MEMO - A nonhydrostatic mesoscale model. *In: Moussiopoulos, N. (ed.): "The EUMAC zooming model", EUROTRAC International Scientific Secretariat, Garmisch-Partenkirchen, Germany*, 7 - 21.
- Neick B. (1992):** Modellierung des Schadstofftransports im Mesoscale- γ am Beispiel des Experimentes auf der Sophienhöhe. *Diplomarbeit, Fachbereich Geowissenschaften, Universität Hamburg*, pp 101.
- Nicholls M.E., Pielke R.A., Eastman J.L., Finley C.A., Lyons W.A., Tremback C.G., Walko R.L. und Cotton W.R. (1994):** Applications of the RAMS numerical model to dispersion over urban areas. *In: Plate, E.J. (ed.): The effect of urbanisation on windfields, air pollution spreading, and wind forces, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands*, in press.
- Nicholson K.W. (1988):** A review of particle suspension. *Atmos. Environ.*, **22**, 2639 - 2652.

- Nickerson E.C., Richard E., Rosset R. und Smith D.R. (1986):** The numerical simulation of clouds, rain and airflow over the Vosges and Black Forest Mountains: a meso-beta model with parameterized microphysics. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 398 - 414.
- Niemeier U. (1992):** Numerische Simulation von Strömungsfeldern im Bereich der Insel Helgoland. *Diplomarbeit, Fachbereich Geowissenschaften, Universität Hamburg, pp 84.*
- Niemeier U. (1993):** Ein einfaches Chemiemodell für Stickstoff- und Schwefeltransport. *Interner Bericht, Meteorologisches Institut, Universität Hamburg, pp 22.*
- Niemeier U. und Schlünzen K.H. (1993):** Modelling steep terrain influences on flow pattern at the Isle of Helgoland. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **66**, 45 - 62.
- Niemeier U., Schlünzen K.H., Bigalke K. und von Salzen K. (1994):** Mesoscale modelling of the atmospheric input of nitrogen, sulphur, and lead into the German Bight for 24 April 1991. *Poster, "Second international conference on air-sea interaction and on meteorology and oceanography of the coastal zone", Lissabon, Portugal, 22-27 September, 1994.*
- Nitz T. (1994):** Untersuchung des Einflusses der Tide auf die Bildung mesoskaliger atmosphärischer Zirkulationssysteme im küstennahen Bereich der Deutschen Bucht. *Diplomarbeit, Fachbereich Geowissenschaften, Universität Hamburg, pp 95.*
- Oeckel H. (1979):** Erfahrungen mit den Vorhersagemodellen. *Fortbildungsveranstaltung über numerische Wettervorhersage, DMG, 135 - 165.*
- Oreskes N., Shrader-Frechette K. und Belitz K. (1994):** Verification, validation, and confirmation of numerical models in earth sciences. *Science*, **263**, 641 - 646.
- Orlanski I. (1975):** A rational subdivision of scales for atmospheric processes. *Bull. Am. Met. Soc.*, **56**, 527 - 530.
- Orlanski I. (1976):** A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. *J. Comp. Phys.*, **21**, 251 - 269.
- Orlanski I. (1981):** The quasi-hydrostatic approximation. *J. Atmos. Sci.*, **38**, 572 - 582.
- Pahl S. (1990):** Parameterisierung der trockenen Deposition in einem mesoskaligen Transport- und Strömungsmodell. *Diplomarbeit, Fachbereich Geowissenschaften, Universität Hamburg, pp 98.*
- Pahl S. und Schlünzen K.H. (1990):** Parameterisierung der trockenen Deposition in einem mesoskaligen Transport- und Strömungsmodell. *Bayerisches Landwirtschaftliches Jahrbuch, Sonderheft 1, 67, 65 - 76.*
- Panofsky H. A. und Brier G. W. (1958):** Some applications of statistics to Meteorology. *The Pennsylvania State University, 174 - 208.*
- Pasquill F. und Smith F.B. (1983):** Atmospheric diffusion. *Ellis Horwood Ltd., Chichester, pp 437.*
- Paulson C. A. (1970):** The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. *J. Appl. Met.*, **9**, 857 - 861.
- Perkey D. J. und Kreitzberg C.W. (1976):** A time-dependent lateral boundary scheme for limited-area primitive equation models. *Mon. Wea. Rev.*, **104**, 744 - 755.
- Physick W. (1976):** A numerical model of the sea-breeze phenomenon over a lake or gulf. *J. Atmos. Sci.*, **33**, 2107 - 2135.
- Physick W.L (1988):** Review: Mesoscale modelling in complex terrain. *Earth-Sci. Rev.*, **25**, 199 - 235.
- Pielke R.A. (1984):** Mesoscale meteorological modeling. *Academic Press, London, pp 612.*
- Pielke R. A. und Mahrer Y. (1975):** Representation of the heated planetary boundary layer in mesoscale models with coarse vertical resolution. *J. Atmos. Sci.*, **32**, 2288 - 2308.
- Pielke R.A., Cotton W.R., Walko R.L., Trembach C.J., Lyons W.A., Grasso L.D., Nicholls M.E., Moran M.D., Wesely D.A., Lee T.J. und Copeland J.H. (1992):** A Comprehensive meteorological modelling system - RAMS. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **49**, 69 - 91.
- Popper K.R. (1982):** Logik der Forschung. *Verlag J.C.B. Mohr (Paul Siebeck), Tübingen, pp 450.*

- Priestly C.H. und Swinbank W.C. (1947):** Vertical transport of heat by turbulence in the atmosphere. *Proc. R. Soc.*, **A189**, 543 - 561.
- Queney P. (1947):** Theory of perturbations in stratified currents with application to airflow over mountain barriers. *Chicago Univ. D., Mic. Rep. No. 23*.
- Raasch S. (1990):** Two numerical case studies of horizontal roll vortices in near-neutral inversion capped planetary boundary layers. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **63**, 205 - 222.
- Randerson D. (1976):** An overview of regional-scale numerical models. *Bull. Am. Met. Soc.*, **57**, 797 - 804.
- Raupach M.R. und Legg B.J. (1983):** Turbulent dispersion from an elevated line source: measurements of wind-concentration moments and budgets. *J. Fluid Mech.*, **136**, 111 - 137.
- Raymond W.H. und Kuo H.L. (1984):** A radiation boundary condition for multi-dimensional flows. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **110**, 535 - 551.
- Renner E., Rolle W. und Helmig D. (1993):** Comparison of computed and measured photooxidant concentrations at a forest site. *Chemosphere*, **27**, 881 - 898.
- Reuter H. und Cehak K. (1966):** Zur Luftverunreinigung durch turbulente Diffusion. *Arch. Met. Geoph. Biokl., A 15*, 192 - 204.
- Roache P.J. (1982):** Computational Fluid Dynamics. *Hermosa Publishers, Albuquerque*, pp 446.
- Roth R.C. (1975):** Der vertikale Transport von Luftbeimengungen in der Prandtl-Schicht und die Deposition-Velocity. *Meteorologische Rdsch.*, **28**, 65 - 71.
- Sandnes H. und Styve H. (1992):** Calculated budgets for airborne acidifying components in Europe, 1985, 1987, 1989, 1990, 1991. *EMEP / IMSC-W Report 1/92*, pp 195.
- Sausen R. (1988):** A closure hypothesis for atmospheric macro-turbulence. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **61**, 155 - 168.
- Savijärvi H. und Alestalo M. (1988):** The Sea Breeze over a lake or gulf as the function of the prevailing flow. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **61**, 98 - 104.
- Schaller E., Werhahn J. und Klemm O. (1995):** Estimation of (trans-boundary) fluxes over complex terrain from aircraft measurements during SANA and TRACT. *Ann. Geophysicae*, **13, Supplement II-C**, 354 - 354.
- Schatzmann M. (1987):** Entwicklung eines mesoskaligen Modells zur Bestimmung von Windschub und Schadstoffkonzentration an der Wasseroberfläche. 2. Zwischenbericht des BMFT-Projektes: Zirkulation und Schadstoffumsatz in der Nordsee (ZISCH), MFU 0545, Universität Hamburg, 50 - 51.
- Schatzmann M., Bigalke K. und Schlünzen K.H. (1990):** Anpassung und Anwendung eines mesoskaligen Modells zur Bestimmung von Windschub und Schadstoffkonzentration an der Wasseroberfläche. Abschlussbericht BMFT-Projekt: Zirkulation und Schadstoffumsatz in der Nordsee (ZISCH), MFU 05765, Universität Hamburg, 25 - 31.
- Schatzmann M., Bigalke K. und Schlünzen K.H. (1991):** Modellierung des atmosphärischen Schadstoffeintrages in räumlich und zeitlich hoher Auflösung für das Gebiet der Deutschen Bucht. 1. Zwischenbericht des BMFT-Projektes: Prozesse im Schadstoffkreislauf Meer-Atmosphäre: Ökosystem Deutsche Bucht (PRISMA), MFU 0620/6, Universität Hamburg, 9 - 21.
- Schatzmann M., Bigalke K., Schlünzen K.H., Neick B. und Niemeier U. (1992a):** Modellierung des atmosphärischen Schadstoffeintrages in räumlich und zeitlich hoher Auflösung für das Gebiet der Deutschen Bucht. 2. Zwischenbericht des BMFT-Projektes: Prozesse im Schadstoffkreislauf Meer-Atmosphäre: Ökosystem Deutsche Bucht (PRISMA), MFU 0620/6, Universität Hamburg, 9 - 19.
- Schatzmann M., Christophers U. und Schlünzen K.H. (1988):** Entwicklung eines mesoskaligen Modells zur Bestimmung von Windschub und Schadstoffkonzentration an der Wasseroberfläche. Abschlussbericht des BMFT-Projektes: Zirkulation und Schadstoffumsatz in der Nordsee (ZISCH), MFU 0545, Universität Hamburg, 84 - 94.
- Schatzmann M., König G. und Lohmeyer A. (1986):** Physikalische Modellierung mikrometeorologischer Vorgänge im Windkanal. *Meteorologische Rdsch.*, **39**, 44 - 59.

- Schatzmann M. und Policastro A. J. (1984):** An advanced integral model for cooling tower plume dispersion. *Atmos. Environ.*, **18**, 663 - 674.
- Schatzmann M. und Schlünzen K.H. (1995):** Simulation der Ozean- Meereis- Atmosphäre Wechselwirkung in polaren Breiten mit einem mesoskaligen Modell. 2. *Zwischenbericht, Kooperationsprojekt zwischen dem Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven, und der Universität Hamburg, Laufzeit des Projektes: 1. August 1993 - 31. Juli 1995*, pp 11.
- Schatzmann M., Schlünzen K.H., Bigalke K., von Salzen K., Nitz T. und Fischer G. (1995):** Modellierung kleinskaliger meteorologischer Phänomene im Küstenvorfeld. *Jahresbericht KUSTOS-Teilprojekt A2*, 18 - 27.
- Schatzmann M., Schlünzen K.H., Bigalke K. und Wosik J. (1993b):** Entwicklung eines Verfahrens zur ereignisabhängigen Probenahme und verallgemeinernden Interpretation von Messungen der nassen Schadstoffdeposition über Meeresoberflächen. *Kurzfassung eines Vortrages zur Zwischenbegutachtung, des BMFT-Forschungsvorhabens 03F0037A*, 29. April 1993, pp 11.
- Schatzmann M., Schlünzen K.H. und Niemeier U. (1994):** Anwendung eines mesoskaligen Modells zur Simulation des Transportes von Schadstoffen und deren chemischer Reaktionen im mitteldeutschen Raum. 1. *Zwischenbericht für das Kooperationsprojekt zwischen dem Institut für Troposphärenforschung und der Universität Hamburg*, pp 5.
- Schatzmann M., Schlünzen K.H., Niemeier U., Herrmann K. und Neick B. (1993a):** Modellierung des atmosphärischen Schadstoffeintrages in räumlich und zeitlich hoher Auflösung für das Gebiet der Deutschen Bucht. 3. *Zwischenbericht des BMFT-Projektes: Prozesse im Schadstoffkreislauf Meer-Atmosphäre: Ökosystem Deutsche Bucht (PRISMA), 03F0558A1, Universität Hamburg*, 8 - 17.
- Schatzmann M., Schlünzen K.H., Niemeier U., Herrmann K. und Nitz T. (1994a):** Modellierung des atmosphärischen Schadstoffeintrages in räumlich und zeitlich hoher Auflösung für das Gebiet der Deutschen Bucht. *Abschlußbericht des BMFT-Projektes: Prozesse im Schadstoffkreislauf Meer-Atmosphäre: Ökosystem Deutsche Bucht (PRISMA), 04F0558A1, Universität Hamburg*, 249 - 255.
- Schlünzen K.H. (1988):** Das mesoskalige Transport- und Strömungsmodell 'METRAS' - Grundlagen, Validierung, Anwendung -. *Hamb. Geophys. Einzelschr.*, **A 88**, pp 139.
- Schlünzen K.H. (1989a):** Die Inlandverlagerung einer Seewindfront an einem tidebeeinflussten Küstenstreifen. *Ann. Meteor.*, **NF26**, 235 - 236.
- Schlünzen K.H. (1989b):** On pollution transport at a coastline with tidally flooded mudflats. *Vortrag, IAMAP-Tagung, Reading, England, 31.7.-11.8.89*.
- Schlünzen K.H. (1990):** Numerical studies on the inland penetration of sea breeze fronts at a coastline with tidally flooded mudflats. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **63**, 243 - 256.
- Schlünzen K.H. (1992):** Modellierung des Strömungsfeldes über Norddeutschland für den 23. Mai 1989. *Ann. Meteor.*, **NF27**, 308 - 309.
- Schlünzen K.H. (1994a):** Mesoscale modelling in complex terrain - an overview on the German nonhydrostatic models. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **67**, 243 - 253.
- Schlünzen K.H. (1994b):** Atmosphärische Einträge von Nähr- und Schadstoffen. In: *Lozán, J.L.; Rachor, E.; Reise, K.; v. Westernhagen, H.; Lenz, W. (eds.): "Warnsignale aus dem Wattenmeer - Wissenschaftliche Fakten", Blackwell Wissenschafts-Verlag, Berlin*, 45 - 48.
- Schlünzen K.H., Bigalke K. und Niemeier U. (1992):** Local atmospheric input patterns in the German Bight. *International Council for the Exploration of the Sea (ICES), C.M. 1992/E:23, Marine Environmental Quality Committee*, pp 12.
- Schlünzen K.H., Bigalke K. und Niemeier U. (1994):** Mesoscale modelling of the atmospheric input into coastal waters. In: *Gryning S-V, Millán M.M. (eds.): Air Pollution Modeling and Its Application X, Plenum Press, New York*, 613 - 614.

- Schlünzen K.H., Bigalke K. und Niemeier U. von Salzen K. (1994):** The mesoscale transport- and fluid-model 'METRAS' -- model concept, model realization -. *Meteorologisches Institut, Universität Hamburg, METRAS Techn. Rep., 1*, pp 150.
- Schlünzen K.H. und Krell U. (1994):** Mean and local transport in air. In: *Sündermann, J. (ed.): "Circulation and contaminant fluxes in the North Sea", Springer Verlag, Berlin, 317 - 344.*
- Schlünzen K.H., McGregor J.L. und Walsh K.J.E. (1995):** Regional climate model results for the Weddell Sea area. *Ann. Meteor., pp 2.*
- Schlünzen K.H. und Niemeier U. (1995):** Changes in nitrogen deposition due to sea level rise in the coastal area of Germany - a numerical case study performed with a nonhydrostatic mesoscale model. *88th Annual Meeting and Exhibition A&WMA, San Antonio, Texas, June 18-23, 1995, pp 14.*
- Schlünzen K.H. und Pahl S. (1992):** Modification of dry deposition in a developing sea-breeze circulation - a numerical case study. *Atmos. Environ., 26 A, 51 - 61.*
- Schlünzen K.H. und Schatzmann M. (1984):** Atmosphärische Mesoscale-Modelle - ein Überblick. *Hamb. Geophys. Einzelschr., B 3, pp 85.*
- Schlünzen K.H. und Schatzmann M. (1989):** Schadstoffeintrag aus der Atmosphäre in die Nordsee. *Arbeiten des Deutschen Fischerei-Verbandes, Heft 48, 40 - 55.*
- Schlünzen K.H. und Schatzmann M. (1991):** Eintrag von Schadstoffen aus der Atmosphäre in die Nordsee. *Arbeiten des Zentrums für Ökosystemforschung, Kiel, Interne Mitteilungen, 4, 23 - 29.*
- Schlünzen K.H., Stahlschmidt T., Rebers T., Niemeier U., Kriews M. und Dannecker W. (1995):** Atmospheric input of lead into the German Bight - a high resolution measurement and model case study for April 23 to 30, 1991. *im internen Review.*
- Schreiber H., Jenderek H. und Roth C. (1993):** Messung der trockenen Deposition auf Laub- und Nadelbäumen mittels natürlich radioaktiver Tracer. *Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK-PEF 110.*
- Schrum C., König P., Michaelsen K., Niemeier U. und Pohlmann T. (1995):** Meteorological and oceanographic situation in the German Bight during 23rd - 29th of April 1991. *Interner Bericht, pp 29.*
- Schulz M. (1993):** Räumliche und zeitliche Verteilung atmosphärischer Einträge von Spurenelementen in die Nordsee. *Dissertation, Fachbereich Chemie, Universität Hamburg, 17, pp 191.*
- Schumann U. (1987):** The countergradient heat flux in turbulent stratified flows. *Nuclear Eng. Design, 100, 255 - 262.*
- Schumann U. (1990):** Large-eddy simulation of the upslope boundary layer. *Quart. J. Roy. Met. Soc., 116, 637 - 670.*
- Schumann U., Hauf T., Höller H., Schmidt H. und Volkert H. (1987):** A mesoscale model for the simulation of turbulence, clouds and flow over mountains: formulation and validation examples. *Beitr. Phys. Atmosph., 60, 413 - 446.*
- Schumann U. und Volkert H. (1984):** Three-dimensional mass- and momentum-consistent Helmholtz-equation in terrain-following coordinates. In: *Hackbusch, W. (ed.): "Efficient Solutions of Elliptic Systems", Vieweg & Sohn, Braunschweig.*
- Schwikowski M., Schulz M., Steiger M., Naumann K. und Dannecker K. (1990):** Transformation and transport of Nitrogen Compounds above the North Sea Investigated by Aircraft Measurements. *J. Aerosol. Sci., 21, 311 - 314.*
- Sehmel G.A. (1980):** Particle and gas dry deposition: a review. *Atmos. Environ., 14, 983 - 1011.*
- Seinfeld J.H. (1986):** Atmospheric chemistry and physics of air pollution. *Wiley & Sons, New York, pp 738.*
- Shapiro R. (1971):** The use of linear filtering as a parameterization of diffusion. *J. Atmos. Sci., 28, 523 - 531.*
- Simpson J.E., Mansfield D.A. und Milford J.R. (1977):** Inland penetration of sea-breeze fronts. *Quart. J. Roy. Met. Soc., 103, 47 - 76.*

- Slinn W.G.N. (1983):** Air-to-sea transfer of particles. In: Liss, P.S., Slinn, W.G.N. (ed.): "Air-sea exchange of gases and particles", D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 299 - 406.
- Smith R. C. (1955):** Theory of air flow over a heated land mass. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **81**, 382 - 395.
- Smith R. C. (1957):** Air motion over a heated land mass : II. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **83**, 248 - 256.
- Smolarkiewicz P.K. (1983):** A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 479 - 486.
- Smolarkiewicz P.K. (1984):** A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion. *J. Comp. Phys.*, **54**, 325 - 362.
- Smolarkiewicz P.K. und Clark T.L. (1986):** The multidimensional positive definite advection transport algorithm: further development and applications. *J. Comp. Phys.*, **67**, 396 - 438.
- Spokes L., Jickells T., Rendell A., Schulz M., Rebers A., Dannecker W., Krüger O., Leermakers M. und Baeyens W. (1993):** High atmospheric nitrogen deposition events over the North Sea. *Mar. Pollut. Bull.*, **26**, 698 - 703.
- Staniforth A., Black T., Courtier P., Klemp J., Lalauette F., Leslie L., Majewski D., Sato N. und Thorpe A. (1994):** Comparison of mesoscale prediction and research experiments. *Newsletter #6*, pp 6.
- Stephens G.L. (1984):** Review: The parameterization of radiation for numerical weather prediction and climate models. *Mon. Wea. Rev.*, **112**, 826 - 867.
- Steppeler J. (1987):** Galerkin and finite element methods in numerical weather prediction. *Bonner Met. Abhandlungen*, **34**, pp 116.
- Stull R.B. (1984):** Transilient turbulence theory. Part I: The concept of eddy-mixing across finite distances. *J. Atmos. Sci.*, **41**, 3351 - 3367.
- Stull R.B. (1988):** An introduction to boundary layer meteorology. *Kluwer Academic Publishers, Dordrecht*.
- Stull R. B. (1994):** A review of parameterization schemes for turbulent boundary-layer processes. *ECMWF Seminar on Parameterization of Sub-Grid Scale Physical Processes, Reading, UK, 5-9 September 1994*.
- Tapp M.C. und White P.W. (1976):** A non-hydrostatic mesoscale model. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **102**, 277 - 296.
- Taubenheim J. (1969):** Statistische Auswertung geophysikalischer und meteorologischer Daten. *Akademische Verlagsgesellschaft Geest Portig K.-G., Leipzig*, pp 386.
- Tennekes H. (1982):** Similarity relations, scaling laws and spectral dynamics. In: F.T.M. Nieuwstadt, H. van Dop (eds.) "Atmospheric turbulence and air pollution modelling", D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 37 - 68.
- Tennekes H. und Lumley J.L. (1972):** A first course in turbulence. *The MIT Press, Cambridge*, pp 300.
- Thehos R. (1991):** Numerische Simulation zum interregionalen Stofftransport über Europa. *Dissertation, Fachbereich Mechanik, Technische Hochschule Darmstadt*, pp 180.
- Thehos R., Pflüger U., Dittmann E., Baltrusch M. und Büchen M. (1994):** Vergleich von Ausbreitungsrechnungen mit der Modellkombination FITNAH / Lagrangesches Partikeldispersionsmodell und dem Verfahren nach TA Luft. *Umweltplanung, Arbeits- und Umweltschutz, Schriftenreihe der Hessischen Landesanstalt für Umwelt, Wiesbaden*, **173**, pp 57.
- Tiedtke M. und Geleyn J.F. (1975):** The DWD general circulation model-description of its main features. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **48**, 255 - 277.
- Tremblay A. und Leighton H. (1986):** A three-dimensional cloud chemistry model. *J. Appl. Met.*, **25**, 652 - 671.

- Tritton D.J. (1977):** Physical fluid dynamics. *Van Nostrand Reinhold Company, New York - Cincinnati - Toronto - London - Melbourne*, pp 362.
- Troen I.B. und Mahrt L. (1986):** A simple model of the atmospheric boundary layer; sensitivity to surface evaporation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **37**, 129 - 148.
- Ulrich W. (1991):** A comparison between hydrostatic and nonhydrostatic simulations of gravity currents and their interaction with Orography. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **46**, 1 - 13.
- Van de Berg L.C.J. und Oerlemans J. (1985):** Simulation of the sea-breeze front with a model of moist convection. *Tellus*, **37A**, 30 - 40.
- van Egmond N. D. und Kesseboom H. (1983):** Mesoscale air pollution dispersion models -II: Lagrangian puff model and comparison with eulerian grid model. *Atmos. Environ.*, **17**, 267 - 274.
- VDI-GIS (VDI-Gemeinschaftsausschuß Industrielle Systemtechnik) (1993):** Software-Zuverlässigkeit: Grundlagen, konstruktive Maßnahmen, Nachweisverfahren. *VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf*, pp 283.
- Vergison E. (1994):** Quality-assurance guide for the evaluation of mathematical models used to simulate and quantify the consequences of major hazards. *SOLVAY, Direction Centrale des Recherches-Laboratoire Central. DCR-LC - EV/EF*, pp 19.
- Vinnichenko N. K. (1970):** The kinetic energy spectrum in the free atmosphere - 1 second to 5 years. *Tellus*, **22**, 158 - 166.
- Voldner E. C., Barrie L. A. und Sirois A. (1986):** A literature review of dry deposition of oxides of sulphur and nitrogen with emphasis on long-range transport modelling in North America. *Atmos. Environ.*, **20**, 2101 - 2123.
- Volkert H. und Bishop C. H. (1990):** The semi-geostrophic Eady problem as a testbed for numerical simulations of frontogenesis. *Tellus*, **42A**, 202 - 207.
- von Salzen K., Schlünzen K.H. und Claussen M. (1995a):** Estimation of the validity range of the blending height concept for the calculation of area-averaged surface fluxes. *Ann. Geophysicae*, **13, Supplement II-C**, 281 - 281.
- von Salzen K., Claussen M. und Schlünzen K.H. (1995b):** Application of the blending height concept for the calculation of surface fluxes in a mesoscale model. *in Vorbereitung*.
- Walcek C.J., Brost R.A. und Chang J.S. (1986):** SO₂, sulfate and HNO₃ deposition velocities computed using regional landuse and meteorological data. *Atmos. Environ.*, **20**, 949 - 964.
- Walko R.L., Tremback C.J., Cotton W.R. und Pielke R.A. (1994):** Improvements to an existing two-way interactive grid nesting scheme. *10th Conference on "Numerical Weather Prediction", Juli 18-22, 1994, Portland, Oregon*.
- Wang P.K. (1993):** Numerical simulations of the cloud microphysical processes in deep convective systems using a 3-d nonhydrostatic cloud. *Vortrag, Geophysikalisches Kolloquium, Universität Hamburg, 15.07.1993*.
- Wang T.T., Altnicker E.R. und Asman W.A.H. (1990):** Numerical simulation of wet scavenging of air pollutants -II modelling of rain composition at the ground. *Atmos. Environ.*, **24A**, 2485 - 2498.
- Wang W. und Seaman N.L. (1994):** A comparison study of convective parameterization schemes in MM5. *10th Conference on "Numerical Weather Prediction", Juli 18-22, 1994, Portland, Oregon, Paper 4B.2*, 99 - 101.
- Webb E.K. (1970):** Profile relationships: the log-linear range, and extension to strong stability. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, **96**, 67 - 90.
- Weber A. H., Buckner M. R. und Weber J. H. (1982):** Statistical performance of several mesoscale atmospheric dispersion models. *J. Appl. Met.*, **21**, 1633 - 1644.
- Wesely M.L. und Hicks B.B. (1977):** Some factors that affect the deposition rate of sulfur dioxide and similar gases on vegetation. *J. Air Pollut.*, **27**, 1110 - 1116.
- Wieringa J. (1980):** A reevaluation of the Kansas mast influence on measurements of stress and cup anemometer overspeeding. *Boundary-Layer Meteorol.*, **18**, 411 - 430.
- Wieringa J. (1993):** Representative roughness parameters for homogeneous terrain. *Boundary-Layer Meteorol.*, **63**, 323 - 363.

- Williamson D.L., Drake J.B., Hack J.J., Jakob R. und Swarztrauber P.N. (1992):** A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry. *J. Comp. Phys.*, **102**, 211 - 224.
- Wippermann F.K. (1981):** The applicability of several approximations in mesoscale modelling - a linear approach. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **54**, 298 - 308.
- Wippermann F.K. und Groß G. (1981):** On the construction of orographically influenced wind roses for given distributions of the large-scale wind. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **54**, 492 - 501.
- Wissenschaftlicher Rat der Dudenredaktion (1991):** Die deutsche Rechtschreibung. *Duden, Meyers Lexikonverlag, Mannheim*, **1**, pp 832.
- Wissenschaftlicher Rat der Dudenredaktion (1990):** Das Fremdwörterbuch. *Duden, Meyers Lexikonverlag, Mannheim*, **5**, pp 832.
- Wu Z. und Schlünzen K.H. (1992):** Numerical study on the local wind structures forced by the complex terrain of Qingdao area. *Acta Meteorol. Sinica*, **6**, 355 - 366.
- Wurzler S., Respondek P., Flossmann A.I. und Pruppacher H.R. (1994):** Simulation of the dynamics, microstructure and cloud chemistry of a precipitating and a non-precipitating cloud by means of a detailed 2-D cloud model. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **67**, 313 - 320.
- Wyngaard J. C. und Côté O. R. (1974):** The evolution of a convective planetary boundary layer - a higher-order-closure model study. *Boundary-Layer Meteorol.*, **7**, 289 - 308.
- Wyngaard J. C., Côté O. R. und Izumi Y. (1971):** Local free convection, similarity, and the budgets of shear stress and heat flux. *J. Atmos. Sci.*, **28**, 1171 - 1182.
- Yamada T. (1982):** A numerical model study of turbulent airflow in and above a forest canopy. *J. Met. Soc. Japan*, **60**, 439 - 454.
- Yamada T. und Mellor G. (1975):** A simulation of the Wangara atmospheric boundary layer data. *J. Atmos. Sci.*, **32**, 2309 - 2329.
- Zeuner G. und Heinemann K. (1990):** Third field experiment on atmospheric dispersion around the isolated hill Sophienhöhe in August / September 1988; Methods - experiments - data base. *Forschungszentrum Jülich, Bericht Nr. 2388*, pp 273.
- Zeuner G. und Heinemann K. (eds.) (1993):** Fourth field experiment on atmospheric dispersion around the isolated hill Sophienhöhe in September 1989. *Forschungszentrum Jülich, Bericht Nr. 2776*, pp 201.

**Meteorologisches Institut
Bundesstr. 55
20146 Hamburg**

<http://www.mi.uni-hamburg.de>

1. Schlüssel, P. ; Taurat, D. (1992): The benefits from a synergy of passive satellite measurements with active LIDAR soundings.
2. Brinkop, S. (1992): Parameterisierung von Grenzschichtwolken für Zirkulationsmodelle.
3. Brümmer, B. [Hrsg.] (1992): ARKTIS 1991- Report on the field phase with examples of measurements.
4. Schulz, J. (1993): Fernerkundung des latenten Wärmeflusses an der Meeresoberfläche.
5. Nodorp, D. (1993): Ein Zirkulationsmodell mit transientem Antrieb.
6. Marotzke, K. (1993): Physikalische Modellierung der Ausbreitung störfallartig freigesetzter schwerer Gase zur Abschätzung von Gefahrenbereichen im bebauten Gelände.
7. Martin, T. (1993): Multispektrale Meereisklassifikation mit passiven Satellitenradiometern.
8. Lunkeit, F. (1993): Simulation der interannualen Variabilität mit einem globalen gekoppelten Atmosphäre-Ozean Modell.
9. Kollewe, M. (1993): Fernerkundung von Wolken mit der Sauerstoff Absorptionsbande im nahen Infrarot.
10. Standfuss, C.; Hollweg, H.-D.; Graßl, H. (1993): The impact of a Radiation Budget Scanner aboard Meteosat second generation on the accuracy of regional budget parameters.
11. Brümmer, B. [Hrsg.] (1993): ARKTIS 1993- Report on the field phase with examples of measurements.
12. Richter, M.C. (1994): Niederschlagsmessung mit dem vertikal ausgerichteten FM-CW-Doppler-Radar-RASS-System - Validierung und Anwendung.
13. Festschrift zum 70. Geburtstag von Prof. Dr. G. Fischer (1994).
14. Khvorostyanov, V.I. (1994): Mesoscale processes of cloud formation, cloud radiation interaction, and their modelling with explicit cloud microphysics.
15. Wyputta, U. (1994): Untersuchungen zum Stofftransport in die Antarktis anhand von Messungen an der Georg-von-Neumayer-Station.
16. Müller, G. (1995): Mesoskalige Zellularkonvektion in Abhängigkeit von unterschiedlichen physikalischen Prozessen und synoptischen Randbedingungen - Numerische Simulationen.
17. Hollweg, H.-D. et al (1995): Interaction at mm and optical frequencies. Part I: Current problems in radiative transfer simulations.
18. Hollweg, H.-D. et al (1995): Interactions at mm and optical frequencies. Part II: Specific atmospheric absorption and emission features: Investigation and modelling.
19. Grötzner, A. (1995): Subskalige partielle Meereisbedeckung in einem globalen atmosphärischen Zirkulationsmodell.
20. Schlüssel, P. (1995): Passive Fernerkundung der unteren Atmosphäre und der Meeresoberfläche aus dem Weltraum.
21. Bartsch, B. (1996): Fernerkundung des Wasserdampfgehalts der Atmosphäre über Land aus rückgestreuter Sonnenstrahlung.

22. Taurat, D. (1996): Windfelder über See unter Verwendung von Satellitendaten und Druckanalysen.
23. Schlünzen, K.H. (1996): Validierung hochauflösender Regionalmodelle.